MATRIX ANALYSIS AND APPLICATIONS

矩阵分析与应用

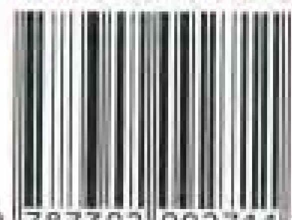
张贤达 著

Zhang Xianda

清华大学出版社

Springer

张贤达：1946年生于江西省兴国县，1970年毕业于原西安军事电信工程学院，1982年获哈尔滨工业大学硕士学位，1987年于日本东北大学获工学博士学位，后在University of California at San Diego做博士后一年，曾在原航空航天部304研究所任高级工程师和研究员多年，1992年9月调入清华大学自动化系任教授，1993年被批准为博士生导师，1999年4月－2002年3月任西安电子科技大学特聘教授（教育部"长江学者奖励计划"），现任清华大学自动化系、清华信息科学与技术国家实验室教授、博士生导师，西安电子科技大学兼职教授、博士生导师。研究方向为信号处理、智能信号处理及其在雷达、通信、音频信号中的应用。曾以第一获奖人获得国家自然科学奖和部级科技进步奖多项，以第一发明人获国家发明专利4项，在国际权威杂志IEEE汇刊和Neural Computation上发表论文近30篇，出版学术著作6部、教材1部。1997年，被国家教育部和人事部评为"全国优秀留学回国人员"。



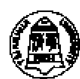
ISBN 7-302-09271-0

9 787302 092711 >

定价：68.00元

MATRIX ANALYSIS AND APPLICATIONS
矩阵分析与应用

张贤达 著
Zhang Xianda

 清华大学出版社 Springer
北京

内容简介

本书将矩阵的分析分为梯度分析、奇异值分析、特征分析、子空间分析与投影分析五大部分，以一种新的体系，系统、全面地介绍矩阵分析的主要理论、方法及应用。全书共10章，内容包括矩阵与线性方程组、特殊矩阵、Toeplitz矩阵、矩阵的变换与分解、梯度分析与最优化、奇异值分析、总体最小二乘方法、特征分析、子空间分析、投影分析。本书取材广泛，内容新颖，理论与应用密切结合。书中介绍了矩阵分析的丰富理论和大量生动应用，可以帮助读者学会如何使用矩阵这一重要数学工具，灵活解决科学和工程技术中的大量问题。

本书适合于需要矩阵知识比较多和比较深的理科（数学、物理、力学等）和信息科学与技术（电子、通信、自动控制、计算机、系统工程、模式识别、信号处理等）等各学科有关教师、研究生和科技人员教学、自学或进修之用。书中归纳了矩阵的众多数学性质和大量有关公式，还可作为矩阵手册使用。

图书在版编目（CIP）数据

矩阵分析与应用/张贤达著．—北京：清华大学出版社，2004.9
ISBN 7-302-09271-0

Ⅰ．矩…　Ⅱ．张…　Ⅲ．矩阵分析　Ⅳ．O151.21

中国版本图书馆CIP数据核字（2004）第084526号

出 版 者：清华大学出版社　　**地　　址**：北京清华大学学研大厦
http://www.tup.com.cn　　**邮　　编**：100084
社 总 机：010-62770175　　**客户服务**：010-62776969
组稿编辑：王一玲
文稿编辑：陈　力
印 装 者：三河市春园印刷有限公司
发 行 者：新华书店总店北京发行所
开　　本：185×260　**印张**：47.75　**字数**：1130千字
版　　次：2004年9月第1版　2004年9月第1次印刷
书　　号：ISBN 7-302-09271-0/O・390
印　　数：1～4000
定　　价：68.00元

本书如存在文字不清、漏印以及缺页、倒页、脱页等印装质量问题，请与清华大学出版社出版部联系调换。联系电话：(010)62770175-3103或(010)62795704

前　言

矩阵不仅是各数学学科，而且也是许多理工学科的重要数学工具。就其本身的研究而言，矩阵理论和线性代数也是极富创造性的领域。它们的创造性又极大地推动和丰富了其他众多学科的发展：许多新的理论、方法和技术的诞生与发展就是矩阵理论和线性代数的创造性应用与推广的结果。可以毫不夸张地说，矩阵理论和线性代数在物理、力学、信号与信息处理、通信、电子、系统、控制、模式识别、土木、电机、航空和航天等众多学科中是最富创造性和灵活性，并起着不可替代作用的数学工具。

作者在从事信号处理、神经计算、通信和模式识别的长期科学研究中，深刻感受到矩阵分析在科学研究中所起的重要作用，并体现在作者和合作者在国际权威和著名杂志发表的一系列论文中。另一方面，在十余年的研究生教学中，笔者对工科尤其是信息科学与技术各学科的研究生在矩阵理论与线性代数方面知识的不足与欠缺颇有体会。矩阵分析理论与方法的重要性，以及作者的教学和研究体会，催发了作者著作本书的意愿。虽然作者的《信号处理中的线性代数》一书曾由科学出版社于 1997 年出版，但本书无论是在体系结构上，还是在内容的组织与安排上，都与《信号处理中的线性代数》大不相同。

国内外出版了不少深受读者喜爱的矩阵理论和线性代数的书籍，而本书试图从一个新的角度，提出从矩阵的梯度分析、奇异值分析、特征分析、子空间分析、投影分析出发，构筑论述矩阵分析的一个新体系。此外，在国内外的有关书籍中，涉及矩阵理论和线性代数的应用时，一般都侧重于某一、二个特定的学科，本书则介绍矩阵分析在数理统计、数值计算、信号处理、电子、通信、模式识别、神经计算、系统科学等多学科中的大量生动应用。鉴于本书介绍的理论与应用的广泛性，故取名《矩阵分析与应用》。

全书共分 10 章，其主要内容可概括如下：

(1) 矩阵分析的基础知识 (第 1 ～ 4 章)：矩阵与线性方程组、特殊矩阵、Toeplitz 矩阵、矩阵的变换与分解。

(2) 梯度分析 (第 5 章)：包括一阶梯度和二阶梯度的计算，以及实现最优化的梯度算法及其重要改进 (递推最小二乘算法、共轭梯度算法、仿射投影算法和自然梯度算法)。

(3) 矩阵的奇异值分析 (第 6 ～ 7 章)：第 6 章介绍奇异值分解及其各种推广 (乘积奇异值分解、广义奇异值分解、约束奇异值分解、结构奇异值)。第 7 章是奇异值分解在线性代数中的应用，介绍总体最小二乘方法、约束总体最小二乘、结构总体最小二乘。

(4) 矩阵的特征分析 (第 8 章)：包含矩阵的特征值分解以及各种推广 (广义特征值分解、Rayleigh 商、广义 Rayleigh 商、二次特征值问题、矩阵的联合对角化)。

(5) 子空间分析 (第 9 章)：子空间的构造、特征子空间分析方法、子空间的跟踪。

(6) 投影分析 (第 10 章)：包含沿着矩阵的基本空间 (列空间或者行空间)，到另一基本空间的正交投影和斜投影。

本书试图在以下方面形成特点：

(1) 加大选材的广度和深度，充分体现内容的新颖性和先进性。为了与矩阵理论的国际新发展“接轨”，书中系统地介绍了矩阵分析的一些新领域、新理论和新方法，如总体最小二乘方法及其推广，二次特征值问题，矩阵的联合对角化，斜投影，子空间方法，仿射投影算法和自然梯度算法等。

(2) 突出矩阵分析理论与科学技术应用的密切结合。本书在介绍每一种重要理论与方法的同时，都会选择介绍相应的应用。而在应用例子的选择上，则尽可能包括比较多的学科。事实上，本书的应用举例不仅涉及数理统计和数值计算等数学领域，更包括了信号处理、电子、通信、模式识别、神经计算、雷达、图像处理、系统辨识等信息科学与技术的不同学科与领域。

(3) 强调创新能力的培养。书中介绍大量应用例子时，侧重于讲述应用的基本机理，其出发点是让读者体会矩阵分析的灵活性与创新性，学会如何使用矩阵分析的工具，进行创新研究。

为便于读者理解重要的概念和方法，书中穿插了大量的例题。为了方便读者检验学习效果，全书在参考全国硕士研究生招生部分数学试题和其他有关文献的基础上，选编了 340 余道习题。此外，本书不仅汇总了矩阵分析有关的大量数学性质和公式，而且汇编了 820 余条索引，可供读者作为一本矩阵手册使用。

本书是从一个工科研究和教学人员的视角进行材料的选择和内容论述的。作者在著作本书的过程中，参考了大量的国外有关矩阵分析与线性代数的论文和著作，其中以 SIAM 的多种杂志为主要参考文献源；而应用的举例则主要参考 IEEE 的几家汇刊。虽然作者竭力而为，但囿于理解水平和能力，书中未能如愿乃至不妥，甚至错误之处可能不乏其例。在此，诚恳希望诸位专家、同仁和广大读者不吝赐教。

作者原本打算对《信号处理中的线性代数》一书作较大修改，最终变成了重写，始自本人在西安电子科技大学任特聘教授之际，完成于回到清华大学任教二年之后，历时四载有余。然而，本书系作者积十余年教学和二十余年科学研究之体会与成果而成，借此机会感谢教育部“长江学者奖励计划”、国家自然科学基金委重大研究项目和多个基金项目、教育部博士点专项基金、国防重点实验室基金、航天支撑技术基金以及 Intel 公司等的课题资助。

全书由笔者使用 LaTeX 撰写及排版。

张贤达

2004 年 6 月谨识于清华大学

目　录

第 1 章　矩阵与线性方程组

在科学与工程中，经常会遇到求解线性方程组的问题。矩阵是描述和求解线性方程组最基本和最有用的数学工具。矩阵不仅有很多基本的数学运算，如转置、内积、外积、逆矩阵、广义逆矩阵等，而且还有多种重要的标量函数，如行列式、范数、迹、秩。本章将介绍矩阵与线性方程组的基本知识，为后面各章全面介绍矩阵的分析及应用提供基础知识。

1.1　矩阵的基本运算

首先引出矩阵和向量的概念，给出本书中经常使用的基本符号。

1.1.1　矩阵与向量

在科学和工程中，经常会遇到 $m\times n$ 线性方程组

$$\left.\begin{array}{c} a_{11}x_1+a_{12}x_2+\cdots+a_{1n}x_n=b_1 \\ a_{21}x_1+a_{22}x_2+\cdots+a_{2n}x_n=b_2 \\ \cdots \\ a_{m1}x_1+a_{m2}x_2+\cdots+a_{mn}x_n=b_m \end{array}\right\} \tag{1.1.1}$$

它使用 m 个方程描述 n 个未知量之间的线性关系。这一线性方程组很容易用矩阵一向量形式简记为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b} \tag{1.1.2}$$

式中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \tag{1.1.3}$$

称为 $m\times n$ 矩阵，是一个按照长方阵列排列的复数或实数集合；而

$$\boldsymbol{x}=\begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix},\quad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} \tag{1.1.4}$$

分别为 $m\times 1$ 向量和 $n\times 1$ 向量，是按照列方式排列的复数或实数集合，统称列向量。类似地，按照行方式排列的复数或实数集合称为行向量，例如

$$\boldsymbol{a}=[a_1,a_2,\cdots,a_n] \tag{1.1.5}$$

是 $1\times n$ 向量。

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以是线性系统、滤波器、无线信道等的符号表示；而科学和工程中遇到的向量可分为三种 [240]：

(1) 物理向量：泛指既有幅值，又有方向的物理量，如速度、加速度、位移等。

(2) 几何向量：为了将物理向量可视化，常用带方向的（简称有向）线段表示之。这种有向线段称为几何向量。例如，$\boldsymbol{v}=\overrightarrow{AB}$ 表示的有向线段，其起点为 A，终点为 B。

(3) 代数向量：几何向量可以用代数形式表示。例如，若平面上的几何向量 $\boldsymbol{v}=\overrightarrow{AB}$ 的起点坐标 $A=(a_1,a_2)$，终点坐标 $B=(b_1,b_2)$，则该几何向量可以表示为代数形式 $\boldsymbol{v}=\begin{bmatrix}b_1-a_1\\ b_2-a_2\end{bmatrix}$。这种用代数形式表示的几何向量称为代数向量。

推而广之，多维空间的几何向量也可用代数形式表示。如无特殊申明，本书今后将以代数向量作为讨论对象。

根据元素取值种类的不同，代数向量又可分为以下三种：

(1) 常数向量：向量的元素全部为实常数或者复常数，如 $\boldsymbol{a}=[1,5,4]^{\mathrm{T}}$ 等。

(2) 函数向量：向量的元素包含了函数值，如 $\boldsymbol{x}=[1,x^2,\cdots,x^n]^{\mathrm{T}}$ 等。

(3) 随机向量：向量的元素为随机变量或者随机过程，如 $\boldsymbol{x}(n)=[x_1(n),x_2(n),\cdots,x_m(n)]^{\mathrm{T}}$，其中，$x_1(n),x_2(n),\cdots,x_m(n)$ 是 m 个随机过程或随机信号。

图 1.1.1 归纳了向量的分类。

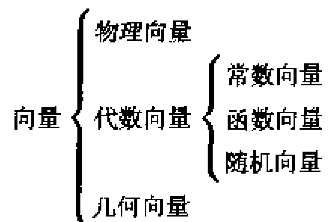


图 1.1.1 向量的分类

若令

$$\boldsymbol{a}_1=\begin{bmatrix}a_{11}\\ a_{21}\\ \vdots\\ a_{m1}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{a}_2=\begin{bmatrix}a_{12}\\ a_{22}\\ \vdots\\ a_{m2}\end{bmatrix},\quad \cdots,\quad \boldsymbol{a}_n=\begin{bmatrix}a_{1n}\\ a_{2n}\\ \vdots\\ a_{mn}\end{bmatrix} \tag{1.1.6}$$

则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以用列向量记作

$$\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n] \tag{1.1.7}$$

一个 $n\times n$ 正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的主对角线是指从左上角到右下角沿 $i=j, j=1,2,\cdots,n$ 相连接的线段。位于主对角线上的元素称为 $\boldsymbol{A}$ 的对角元素，它们是 $a_{11},a_{22},\cdots,a_{nn}$。平行于主对角线沿 $|i-j|=$ 常数 相连接的线段称为 $\boldsymbol{A}$ 的对角线。

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 从右上角到左下角沿

$$(i,n-i+1),\quad i=1,2,\cdots,n$$

相连接的线段称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的交叉对角线 (也称次对角线)，它垂直于主对角线。

主对角线以外元素全部为零的 $n\times n$ 矩阵称为对角矩阵，记作

$$\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_{11},d_{22},\cdots,d_{nn}) \tag{1.1.8}$$

若对角矩阵主对角线元素全部等于 1，则称其为单位矩阵，用符号 $\boldsymbol{I}_{n\times n}$ 示之。所有元素为零的 $m\times n$ 矩阵称为零矩阵，记为 $\boldsymbol{O}_{m\times n}$。

一个全部元素为零的向量称为零向量。当维数已经明了或者不紧要时，常省去单位矩阵、零矩阵和零向量表示维数的下标，将它们分别简记为 $\boldsymbol{I},\boldsymbol{O}$ 和 $\boldsymbol{0}$。

只有一个元素为 1，其他元素皆等于 0 的列向量称为基本向量，即

$$\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\1\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix},\quad \cdots,\quad \boldsymbol{e}_n=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\\vdots\\1\end{bmatrix} \tag{1.1.9}$$

显然，$n\times n$ 单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 可以用 n 个基本向量表示为 $\boldsymbol{I}=[\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\cdots,\boldsymbol{e}_n]$。

在本书中，我们经常会用到矩阵符号 $\boldsymbol{A}(i_1:i_p,j_1:j_q)$，它代表由 $\boldsymbol{A}$ 的第 $i_1\sim i_p$ 行和第 $j_1\sim j_q$ 列组成的一个子矩阵。例如

$$\boldsymbol{A}(3:6,2:4)=\begin{bmatrix}a_{32}&a_{33}&a_{34}\\a_{42}&a_{43}&a_{44}\\a_{52}&a_{53}&a_{54}\\a_{62}&a_{63}&a_{64}\end{bmatrix}$$

分块矩阵是一个以矩阵作元素的矩阵：

$$\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{A}_{ij}]=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11}&\boldsymbol{A}_{12}&\cdots&\boldsymbol{A}_{1n}\\\boldsymbol{A}_{21}&\boldsymbol{A}_{22}&\cdots&\boldsymbol{A}_{2n}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\\boldsymbol{A}_{m1}&\boldsymbol{A}_{m2}&\cdots&\boldsymbol{A}_{mn}\end{bmatrix}$$

1.1.2 矩阵的基本运算

令 R 表示实数集合，C 表示复数集合。一个复矩阵定义为按照长方阵列排列的复数集合，记作

$$\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}\Leftrightarrow \boldsymbol{A}=[a_{ij}],\ a_{ij}\in C,\quad i=1,2,\cdots,m;\ j=1,2,\cdots,n \tag{1.1.10}$$

类似地，一个实矩阵记作

$$A \in R^{m\times n} \Leftrightarrow A = [a_{ij}],\ a_{ij} \in R, \quad i = 1,2,\cdots,m,\ j = 1,2,\cdots,n \tag{1.1.11}$$

定义 1.1.1　若 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 的转置记作 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$，是一个 $n\times m$ 矩阵，定义为 $[\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}]_{ij} = a_{ji}$；矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的复数共轭 $\boldsymbol{A}^*$ 定义为 $[\boldsymbol{A}^*]_{ij} = a_{ij}^*$；复共轭转置记作 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，定义为

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* & \cdots & a_{m1}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* & \cdots & a_{m2}^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{1n}^* & a_{2n}^* & \cdots & a_{mn}^* \end{bmatrix} \tag{1.1.12}$$

共轭转置又叫 Hermitian 伴随、Hermitian 转置或 Hermitian 共轭。满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}$ 的正方复矩阵称为 Hermitian 矩阵或共轭对称矩阵。

共轭转置与转置之间存在下列关系：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{A}^*)^{\mathrm{T}} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^* \tag{1.1.13}$$

一个 $m\times n$ 分块矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的共轭转置是一个由 $\boldsymbol{A}$ 的元素的共轭转置组成的 $n\times m$ 分块矩阵：

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_{11}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{A}_{21}^{\mathrm{H}} & \cdots & \boldsymbol{A}_{m1}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{A}_{12}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{A}_{22}^{\mathrm{H}} & \cdots & \boldsymbol{A}_{m2}^{\mathrm{H}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \boldsymbol{A}_{1n}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{A}_{2n}^{\mathrm{H}} & \cdots & \boldsymbol{A}_{mn}^{\mathrm{H}} \end{bmatrix}$$

列向量的转置结果为行向量，行向量的转置结果为列向量。由于书中遇到的大多数向量为列向量，为节省书写的空间，本书采用转置符号 T 将 $m\times 1$ 列向量记作 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_m]^{\mathrm{T}}$。

矩阵最简单的代数运算是两个矩阵的加法、矩阵与一个标量的乘法。

定义 1.1.2　两个 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 和 $\boldsymbol{B} = [b_{ij}]$ 之和记作 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}$，定义为 $[\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}]_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$。

定义 1.1.3　令 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，且 α 是一个标量。乘积 $\alpha\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，定义为 $[\alpha\boldsymbol{A}]_{ij} = \alpha a_{ij}$。

定义 1.1.3 可以推广为矩阵与向量的乘积、矩阵与矩阵的乘积。

定义 1.1.4　$m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 与 $r\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_r]^{\mathrm{T}}$ 的乘积 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 只有当 $n = r$ 时才存在，它是一个 $m\times 1$ 向量，定义为

$$[\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}]_i = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_j, \quad i = 1,2,\cdots,m$$

定义 1.1.5　$m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 与 $r\times s$ 矩阵 $\boldsymbol{B} = [b_{ij}]$ 的乘积 $\boldsymbol{AB}$ 只有当 $n = r$ 时才存在，它是一个 $m\times s$ 矩阵，定义为

$$[\boldsymbol{AB}]_{ij} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}b_{kj}, \quad i = 1,2,\cdots,m;\ j = 1,2,\cdots,s$$

根据定义，容易验证矩阵的加法服从下面的运算规则。

- 加法交换律 (commutative law of addition)：$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}$
- 加法结合律 (associative law of addition)：$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})+\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}+(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C})$

定理 1.1.1 矩阵的乘积服从下面的运算法则。

(1) 乘法结合律 (associative law of multiplication)：若 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n},\boldsymbol{B}\in C^{n\times p},\boldsymbol{C}\in C^{p\times q}$，则 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{BC})=(\boldsymbol{AB})\boldsymbol{C}$。

(2) 乘法左分配律 (left distributive law of multiplication)：若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个 $m\times n$ 矩阵，且 $\boldsymbol{C}$ 是一个 $n\times p$ 矩阵，则 $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}=\boldsymbol{AC}+\boldsymbol{BC}$。

(3) 乘法右分配律 (right distributive law of multiplication)：若 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，并且 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 是两个 $n\times p$ 矩阵，则 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C})=\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{AC}$。

(4) 若 α 是一个标量，并且 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个 $m\times n$ 矩阵，则 $\alpha(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})=\alpha\boldsymbol{A}+\alpha\boldsymbol{B}$。

证明 这里只证明 (1) 和 (2)，其他部分的证明留给读者作练习。

(1) 令 $\boldsymbol{A}_{m\times n}=[a_{ij}],\boldsymbol{B}_{n\times p}=[b_{ij}],\boldsymbol{C}_{p\times q}=[c_{ij}]$，则

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{BC})]_{ij}&=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}(\boldsymbol{BC})_{kj}=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}\left[\sum_{l=1}^{p}b_{kl}c_{lj}\right]\\&=\sum_{l=1}^{p}\sum_{k=1}^{n}(a_{ik}b_{kl})c_{lj}=\sum_{l=1}^{p}[\boldsymbol{AB}]_{il}c_{lj}\\&=[(\boldsymbol{AB})\boldsymbol{C}]_{ij}\end{aligned}$$

即有 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{BC})=(\boldsymbol{AB})\boldsymbol{C}$。

(2) 由矩阵的乘法知

$$[\boldsymbol{AC}]_{ij}=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}c_{kj},\qquad[\boldsymbol{BC}]_{ij}=\sum_{k=1}^{n}b_{ik}c_{kj}$$

再由矩阵的加法，得

$$[\boldsymbol{AC}+\boldsymbol{BC}]_{ij}=[\boldsymbol{AC}]_{ij}+[\boldsymbol{BC}]_{ij}=\sum_{k=1}^{n}(a_{ik}+b_{ik})c_{kj}=[(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}]_{ij}$$

故有 $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}=\boldsymbol{AC}+\boldsymbol{BC}$。 ■

一般说来，矩阵的乘法不满足交换律，即 $\boldsymbol{AB}\neq\boldsymbol{BA}$。

令向量 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{y}=[y_1,y_2,\cdots,y_n]^{\mathrm{T}}$，矩阵与向量的乘积 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 可视为向量 $\boldsymbol{x}$ 的线性变换结果。此时，$n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为线性变换矩阵。若向量 $\boldsymbol{y}$ 到 $\boldsymbol{x}$ 的线性逆变换 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 存在，则

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{y}\tag{1.1.14}$$

这一方程可视为在原线性变换 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 两边左乘 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 之后得到的结果 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{y}$。因此，线性逆变换 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 应该满足 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$ 之关系。另一方面，$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{y}$ 也是可逆的，

即两边左乘 $\boldsymbol{A}$ 后得到的 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{AA}^{-1}\boldsymbol{y}$ 应该与原线性变换 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 一致，故 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 还应该满足 $\boldsymbol{AA}^{-1} = \boldsymbol{I}$。

综合以上讨论，可以得到逆矩阵的定义如下。

定义 1.1.6 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n \times n$ 矩阵。称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆，若可以找到一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 满足 $\boldsymbol{AA}^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$，并称 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵。

下面是共轭、转置、共轭转置和逆矩阵的性质。

(1) 矩阵的共轭、转置和共轭转置满足分配律：

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^* = \boldsymbol{A}^* + \boldsymbol{B}^*$$
$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$$
$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}$$

(2) 矩阵乘积的转置、共轭转置和逆矩阵满足关系式

$$(\boldsymbol{AB})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$$
$$(\boldsymbol{AB})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$$
$$(\boldsymbol{AB})^{-1} = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \quad (\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}\ \text{为可逆的正方矩阵})$$

(3) 共轭、转置和共轭转置等符号均可与求逆符号交换，即有

$$(\boldsymbol{A}^*)^{-1} = (\boldsymbol{A}^{-1})^*, \quad (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{-1} = (\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{T}}, \quad (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1} = (\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}$$

因此，常常分别采用紧凑的数学符号 $\boldsymbol{A}^{-*}, \boldsymbol{A}^{-\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{A}^{-\mathrm{H}}$。

(4) 对于任意矩阵 $\boldsymbol{A}$，矩阵 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 都是 Hermitian 矩阵。若 $\boldsymbol{A}$ 可逆，则对于 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$，有 $\boldsymbol{A}^{-\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^{-\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{I}$。

在一些应用中，常常涉及一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与它自身的乘积，从中可以引出两个重要的概念。

定义 1.1.7 矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 称为幂等矩阵 (idempotent matrix)，若 $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{AA} = \boldsymbol{A}$。

定义 1.1.8 矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 称为对合矩阵 (involutory matrix)，若 $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{AA} = \boldsymbol{I}$。

与矩阵乘积密切相关的运算是两个矩阵之间的内积。

令 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{B} \in C^{m\times p}$ 为复矩阵。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的内积记作 $\langle \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \rangle$，定义为

$$\langle \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \rangle = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B} \tag{1.1.15}$$

除了上述矩阵的基本运算外，还可定义矩阵的指数和对数 [296],[184]

$$\exp(\boldsymbol{A}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\boldsymbol{A}^k \tag{1.1.16}$$

$$\log(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A}) = -\sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!}\boldsymbol{A}^k \tag{1.1.17}$$

如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的元素 a_{ij} 都是参数 t 的函数，则矩阵的导数定义为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t} = \dot{\boldsymbol{A}} = \begin{bmatrix} \frac{\mathrm{d}a_{11}}{\mathrm{d}t} & \frac{\mathrm{d}a_{12}}{\mathrm{d}t} & \cdots & \frac{\mathrm{d}a_{1n}}{\mathrm{d}t} \\ \frac{\mathrm{d}a_{21}}{\mathrm{d}t} & \frac{\mathrm{d}a_{22}}{\mathrm{d}t} & \cdots & \frac{\mathrm{d}a_{2n}}{\mathrm{d}t} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\mathrm{d}a_{m1}}{\mathrm{d}t} & \frac{\mathrm{d}a_{m2}}{\mathrm{d}t} & \cdots & \frac{\mathrm{d}a_{mn}}{\mathrm{d}t} \end{bmatrix} \tag{1.1.18}$$

同样可定义矩阵的高阶导数。

矩阵的积分定义为

$$\int \boldsymbol{A}\mathrm{d}t = \begin{bmatrix} \int a_{11}\mathrm{d}t & \int a_{12}\mathrm{d}t & \cdots & \int a_{1n}\mathrm{d}t \\ \int a_{21}\mathrm{d}t & \int a_{22}\mathrm{d}t & \cdots & \int a_{2n}\mathrm{d}t \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \int a_{m1}\mathrm{d}t & \int a_{m2}\mathrm{d}t & \cdots & \int a_{mn}\mathrm{d}t \end{bmatrix} \tag{1.1.19}$$

同样也可定义矩阵的多重积分。

类似地，可定义矩阵函数及其导数：

(1) 指数矩阵函数

$$\exp(\boldsymbol{A}t) = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{A}t + \frac{\boldsymbol{A}^2t^2}{2!} + \frac{\boldsymbol{A}^3t^3}{3!} + \cdots \tag{1.1.20}$$

(2) 指数矩阵函数的导数

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\exp(\boldsymbol{A}t) = \boldsymbol{A}\exp(\boldsymbol{A}t) = \exp(\boldsymbol{A}t)\boldsymbol{A} \tag{1.1.21}$$

(3) 矩阵乘积的导数

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{B} + \boldsymbol{A}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{B}}{\mathrm{d}t} \tag{1.1.22}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都是变量 t 的矩阵函数。

1.1.3 向量的线性无关性与非奇异矩阵

考查式 (1.1.1) 描述的 $m \times n$ 线性方程组，它可写成矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$。若记 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$，则式 (1.1.1) 的 m 个方程可以合并写成标量与向量乘积之和：

$$\boldsymbol{a}_1x_1 + \boldsymbol{a}_2x_2 + \cdots + \boldsymbol{a}_nx_n = \boldsymbol{b}$$

并称为列向量 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ 的线性组合。

定义 1.1.9 一组 m 维向量 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n\}$ 称为线性无关，若方程

$$c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + c_n\boldsymbol{u}_n = \boldsymbol{0}$$

只有零解 $c_1 = c_2 = \cdots = c_n = 0$。若能够找到一组不全部为零的系数 $c_1, c_2, \cdots, c_n$ 使得上述方程成立，则称 m 维向量组 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n\}$ 线性相关。

向量的线性无关可以准确地描述什么样的 $n \times n$ 线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 具有唯一的非零解 $\boldsymbol{x}$。

定义 1.1.10　一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是非奇异的，当且仅当矩阵方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ 只有零解 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$。若 $\boldsymbol{A}$ 不是非奇异的，则称 $\boldsymbol{A}$ 奇异。

由于线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ 等价为

$$\boldsymbol{a}_1 x_1 + \boldsymbol{a}_2 x_2 + \cdots + \boldsymbol{a}_n x_n = \boldsymbol{0}$$

式中，$\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$。由定义 1.1.10 立即可以得出结论：当且仅当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ 线性无关时，矩阵方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ 只有零解 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是非奇异的。由于这一结果的重要性，现用定理形式叙述之。

定理 1.1.2　$n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$ 是非奇异的，当且仅当它的 n 个列向量 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$ 线性无关。

1.1.4　初等行变换与阶梯型矩阵

涉及矩阵行与行之间的简单运算称为初等行运算。事实上，矩阵的初等行运算往往可以解决一些重要问题。例如，只使用初等行运算，就可以解决矩阵方程求解、矩阵求逆和矩阵的基本空间的基向量构造等复杂问题。

定义 1.1.11　令矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{m \times n}$ 的 m 个行向量分别为 $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_m$。下列运算称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的初等行运算 (elementary row operation) 或初等行变换：

(1) 互换矩阵的任意两行，如 $\boldsymbol{r}_p \leftrightarrow \boldsymbol{r}_q$，称为 I 型初等行变换。

(2) 一行元素同乘一个非零常数 α，如 $\alpha \boldsymbol{r}_p \to \boldsymbol{r}_p$，称为 II 型初等行变换。

(3) 将第 p 行元素同乘一个非零常数 β 后，加给第 q 行，即 $\beta \boldsymbol{r}_p + \boldsymbol{r}_q \to \boldsymbol{r}_q$，称为III型初等行变换。

若矩阵 $\boldsymbol{A}_{m \times n}$ 经过一系列初等行运算，变换成为矩阵 $\boldsymbol{B}_{m \times n}$，则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 为行等价矩阵 (row equivalent matrix)。

一个非零行最左边的非零元素称为该行的首项元素 (leading entry)。如果首项元素等于 1，便称之为首一元素 (leading 1 entry)。

从矩阵方程的求解以及基本空间的基向量构造等应用出发，常常希望将一个矩阵经过初等行运算之后，变换为阶梯型矩阵。

定义 1.1.12　一个 $m \times n$ 矩阵称为阶梯型 (echelon form) 矩阵，若

(1) 全部由零组成的所有行都位于矩阵的底部。

(2) 每一个非零行的首项元素总是出现在上一个非零行的首项元素的右边。

(3) 首项元素下面的同列元素全部为零。

例如，下面是阶梯型矩阵的几个例子：

$$A = \begin{bmatrix} 2 & * & * \\ 0 & 5 & * \\ 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad A = \begin{bmatrix} 1 & * & * \\ 0 & 3 & * \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

和

$$A = \begin{bmatrix} 3 & * & * \\ 0 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \qquad A = \begin{bmatrix} 0 & 1 & * \\ 0 & 0 & 9 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

式中，$*$ 表示该元素可以为任意值。

定义 1.1.13 [240] 一个阶梯型矩阵称为简约阶梯型 (reduced echelon form)，若每一非零行的首项元素等于 1 (即为首一元素)，并且每一个首一元素也是它所在列唯一的非零元素。

给定一个 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$，下面的算法通过初等行变换将 $\boldsymbol{B}$ 化成简约阶梯型矩阵。

算法 1.1.1 (将 $m \times n$ 矩阵化成简约阶梯型) [240]

步骤 1 将含有一个非零元素的列设定为最左边的第 1 列。

步骤 2 如果需要，将第 1 行与其他行互换，以使第 1 个非零列在第 1 行有一个非零元素。

步骤 3 如果第 1 行的首项元素为 a，则将该行的所有元素乘以 $1/a$，以使该行的首项元素等于 1，成为首一元素。

步骤 4 通过初等行变换，将其他行位于第 1 行首一元素下面的全部元素变成 0。

步骤 5 对第 $i = 2, 3, \cdots, m$ 行依次重复以上步骤，以使每一行的首一元素出现在上一行的首一元素的右边，并使与第 i 行首一元素同列的其他各行元素都变为 0。

下面的定理表明，一个矩阵通过初等行变换，可以变换为唯一的一个简约阶梯型矩阵。

定理 1.1.3 任何一个矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 都与一个并且唯一的一个简约阶梯型矩阵是行等价的。

证明 参见文献 [274, Appendix A]。

当矩阵的初等行变换产生一个阶梯型矩阵时，若将阶梯型矩阵进一步简化为简约阶梯型，则相应的初等行变换将不会改变阶梯型矩阵各非零行首项元素的位置。就是说，任何一个矩阵的阶梯型的首项元素与简约阶梯型的首一元素总是处于相同的位置。由此可以引出下面的定义。

定义 1.1.14 [274, p.15] 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的主元位置 (pivot position) 就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中与其阶梯型的首项元素相对应的位置。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中包含主元位置的每一列都称为 $\boldsymbol{A}$ 的主元列 (pivot column)。

下面的例子说明如何通过初等行运算，将一个矩阵变换为阶梯型和简约阶梯型，以及如何判断原矩阵的主元列。

例 1.1.1　已知 3×5 矩阵

$$A=\begin{bmatrix}-3 & 6 & -1 & 1 & -7\\ 1 & -2 & 2 & 3 & -1\\ 2 & -4 & 5 & 8 & -4\end{bmatrix}$$

第 2 行乘 -2，加到第 3 行；并且第 2 行乘 3，加到第 1 行，则

$$A\sim\begin{bmatrix}0 & 0 & 5 & 10 & -10\\ 1 & -2 & 2 & 3 & -1\\ 0 & 0 & 1 & 2 & -2\end{bmatrix}$$

第 1 行乘 $-2/5$，加到第 2 行；同时第 1 行乘 $-1/5$，加到第 3 行，得

$$A\sim\begin{bmatrix}0 & 0 & 5 & 10 & -10\\ 1 & -2 & 0 & -1 & 3\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}$$

交换第 1 行和第 2 行，又得到

$$A\sim\begin{bmatrix}\underline{1} & -2 & 0 & -1 & 3\\ 0 & 0 & \underline{5} & 10 & -10\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}\qquad\text{(阶梯型)}$$

下面画有横杠的元素所在的位置称为主元位置。因此，矩阵 A 的主元列为第 1 列和第 3 列，即

$$\begin{bmatrix}-3\\ 1\\ 2\end{bmatrix},\quad\begin{bmatrix}-1\\ 2\\ 5\end{bmatrix}\qquad\text{(A 的主元列)}$$

进一步地，第 2 行乘以 1/5，阶梯型简化为

$$A\sim\begin{bmatrix}1 & -2 & 0 & -1 & 3\\ 0 & 0 & 1 & 2 & -2\\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0\end{bmatrix}\qquad\text{(简约阶梯型)}$$

1.1.5　基于初等行变换的矩阵方程求解

下面讨论如何利用初等行变换，对矩阵方程求解。有关初等行变换在矩阵求逆和矩阵基本空间的基向量构造将分别在 1.6.4 节和第 9 章介绍。

对一个 $n\times n$ 矩阵方程 $Ax=b$，其增广矩阵 $B=[A,b]$ 为 $n\times(n+1)$ 维。若对增广矩阵 B 使用初等行变换，使得最左边变成一个 $n\times n$ 单位矩阵，则变换后的增广矩阵的第 $n+1$ 列即给出原矩阵方程 $Ax=b$ 的解 x。这样一种方法称为高斯消去 (Gauss elimination) 法或 Gauss-Jordan 消去法。

例 1.1.2　用高斯消去法求解线性方程组

$$x_1+x_2+2x_3=6$$

$$3x_1+4x_2-x_3=5$$

$$-x_1+x_2+x_3=2$$

首先写出方程组和增广矩阵

$$\begin{aligned} x_1+x_2+2x_3&=6 \\ 3x_1+4x_2-x_3&=5 \\ -x_1+x_2+x_3&=2 \end{aligned} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 6 \\ 3 & 4 & -1 & 5 \\ -1 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

第 2 行减去第 1 行的 3 倍，得

$$\begin{aligned} x_1+x_2+2x_3&=6 \\ x_2-7x_3&=-13 \\ -x_1+x_2+x_3&=2 \end{aligned} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 6 \\ 0 & 1 & -7 & -13 \\ -1 & 1 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

第 1 行加到第 3 行，有

$$\begin{aligned} x_1+x_2+2x_3&=6 \\ x_2-7x_3&=-13 \\ 2x_2+3x_3&=8 \end{aligned} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 6 \\ 0 & 1 & -7 & -13 \\ 0 & 2 & 3 & 8 \end{bmatrix}$$

第 1 行减去第 2 行，结果为

$$\begin{aligned} x_1+9x_3&=19 \\ x_2-7x_3&=-13 \\ 2x_2+3x_3&=8 \end{aligned} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 9 & 19 \\ 0 & 1 & -7 & -13 \\ 0 & 2 & 3 & 8 \end{bmatrix}$$

第 3 行减去第 2 行的 2 倍，则

$$\begin{aligned} x_1+9x_3&=19 \\ x_2-7x_3&=-13 \\ 17x_3&=34 \end{aligned} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 9 & 19 \\ 0 & 1 & -7 & -13 \\ 0 & 0 & 17 & 34 \end{bmatrix}$$

第 3 行乘以 1/17，即有

$$\begin{aligned} x_1+9x_3&=19 \\ x_2-7x_3&=-13 \\ x_3&=2 \end{aligned} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 9 & 19 \\ 0 & 1 & -7 & -13 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

第 1 行减去第 3 行的 9 倍，又有

$$\begin{aligned} x_1&=1 \\ x_2-7x_3&=-13 \\ x_3&=2 \end{aligned} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & -7 & -13 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

第 3 行乘以 7 后，再加到第 2 行，最后得

$$\begin{aligned} x_1&=1 \\ x_2&=1 \\ x_3&=2 \end{aligned} \qquad \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

即通过高斯消去法得到方程组的解为 $x_1=1$, $x_2=1$ 和 $x_3=2$。

初等行变换方法也适用于 $m\times n$ 矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的求解。此时，需要将增广矩阵化成简约阶梯型矩阵。具体算法如下。

算法 1.1.2 ($m\times n$ 矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的求解) [240]

步骤 1 构造增广矩阵 $\boldsymbol{B}=[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{b}]$。

步骤 2 使用算法 1.1.1 将增广矩阵 $\boldsymbol{B}$ 化成简约阶梯型矩阵，它与原增广矩阵等价。

步骤 3 从简化的矩阵得到对应的线性方程组，它与原线性方程组等价。

步骤 4 得到新的线性方程组的通解 (general solution)。

例 1.1.3 考查线性方程组

$$\begin{aligned}2x_1+2x_2-x_3&=1\\-2x_1-2x_2+4x_3&=1\\2x_1+2x_2+5x_3&=5\\-2x_1-2x_2-2x_3&=-3\end{aligned}$$

其增广矩阵为

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}2&2&-1&1\\-2&-2&4&1\\2&2&5&5\\-2&-2&-2&-3\end{bmatrix}$$

第 1 行元素乘以 1/2，使第 1 个元素为 1：

$$\begin{bmatrix}2&2&-1&1\\-2&-2&4&1\\2&2&5&5\\-2&-2&-2&-3\end{bmatrix}\rightarrow\begin{bmatrix}1&1&-\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\-2&-2&4&1\\2&2&5&5\\-2&-2&-2&-3\end{bmatrix}$$

利用初等行变换，使第 2～4 行的第 1 个元素都变成 0：

$$\begin{bmatrix}1&1&-\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\-2&-2&4&1\\2&2&5&5\\-2&-2&-2&-3\end{bmatrix}\rightarrow\begin{bmatrix}1&1&-\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\0&0&3&2\\0&0&6&4\\0&0&-3&-2\end{bmatrix}$$

第 2 行元素乘以 1/3，使得其第 3 列元素等于 1，即有

$$\begin{bmatrix}1&1&-\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\0&0&3&2\\0&0&6&4\\0&0&-3&-2\end{bmatrix}\rightarrow\begin{bmatrix}1&1&-\frac{1}{2}&\frac{1}{2}\\0&0&1&\frac{2}{3}\\0&0&6&4\\0&0&-3&-2\end{bmatrix}$$

利用初等行变换，使第 2 行首项元素 1 的上边和下边的元素全部变为 0，得到

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & 6 & 4 \\ 0 & 0 & -3 & -2 \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & \frac{5}{6} \\ 0 & 0 & 1 & \frac{2}{3} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

对应的线性方程组为

$$x_1 + x_2 = \frac{5}{6}$$
$$x_3 = \frac{2}{3}$$

该方程组有无穷多组解，其通解为 $x_1 = \frac{5}{6} - x_2, x_3 = \frac{2}{3}$。若 $x_2 = 1$，则得一特解 (particular solution) 为 $x_1 = -\frac{1}{6}, x_2 = 1$ 和 $x_3 = \frac{2}{3}$。

如果线性方程组 (1.1.1) 的右边全部等于零，即

$$\left.\begin{aligned} a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n &= 0 \\ a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n &= 0 \\ &\cdots \\ a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n &= 0 \end{aligned}\right\} \tag{1.1.23}$$

则称之为齐次线性方程组 (homogeneous linear system of equations)。

显然，$\boldsymbol{x} = [0, 0, \cdots, 0]^{\mathrm{T}}$ 是任何齐次线性方程组的一个解。这样的全零解称为平凡解 (trivial solution)。平凡解以外的任何其他解称为非平凡解 (nontrivial solution)。

齐次线性方程组一定有解，因为它至少有一个平凡解。在这个意义上，齐次线性方程组是一致的。齐次线性方程组的解只有两种可能：(1) 只有唯一的平凡解；(2) 除了平凡解外，还有无穷多个非平凡解。

任何一个复矩阵方程 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} = \boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 都可以写为

$$(\boldsymbol{A}_r + \mathrm{j}\,\boldsymbol{A}_i)(\boldsymbol{x}_r + \mathrm{j}\,\boldsymbol{x}_i) = \boldsymbol{b}_r + \mathrm{j}\,\boldsymbol{b}_i \tag{1.1.24}$$

式中，$\boldsymbol{A}_r, \boldsymbol{x}_r, \boldsymbol{b}_r$ 和 $\boldsymbol{A}_i, \boldsymbol{x}_i, \boldsymbol{b}_i$ 分别代表 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{b}$ 的实部和虚部。展开上式，得

$$\boldsymbol{A}_r\boldsymbol{x}_r - \boldsymbol{A}_i\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{b}_r \tag{1.1.25}$$

$$\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{x}_r + \boldsymbol{A}_r\boldsymbol{x}_i = \boldsymbol{b}_i \tag{1.1.26}$$

利用矩阵分块形式，上式可合并为

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_r & -\boldsymbol{A}_i \\ \boldsymbol{A}_i & \boldsymbol{A}_r \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_r \\ \boldsymbol{x}_i \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_r \\ \boldsymbol{b}_i \end{bmatrix} \tag{1.1.27}$$

于是，含 n 个复未知数的 m 个复方程转变为含 $2n$ 个实未知数的 $2m$ 个实方程。

1.2 向量空间、内积空间与线性映射

虽然许多工程问题也可以不使用线性空间进行研究，但是线性空间的使用却可以给问题的描述带来诸多的方便。本质上讲，线性空间是某一类事物在矩阵代数里的一个抽象的集合表示，线性映射或线性变换则反映线性空间中元素间最基本的线性联系，它们为线性函数的研究提供了极大的方便。可以说，线性代数就是研究线性空间和线性变换理论的数学分支。例如，一个 2×1 向量 $[x_0,y_0]^{\mathrm{T}}$ 可以想象成用笛卡儿坐标 x,y 表示的平面上的某个点。类似地，一个 3×1 向量 $[x_0,y_0,z_0]^{\mathrm{T}}$ 可认为是三维空间的一个点。我们生活的实际世界就是一个典型的三维空间。依此类推，一个 $n\times 1$ 向量可视为 n 维空间的一个点。因此，n 维空间很自然地是所有 $n\times 1$ 向量的集合。显然，n 维空间是一维空间 (即直线)、二维空间 (即平面) 和我们居住的三维空间的推广。

1.2.1 集合的基本概念

在引出向量空间和子空间的定义之前，先介绍集合的有关概念。顾名思义，集合就是某些元素的集体表示。

集合通常用花括号表示为 $S=\{\cdot\}$，花括号内为集合 S 的元素。如果集合的元素只有几个，通常便在花括号内罗列出所有的元素，例如 $S=\{a,b,c,d\}$。若 S 是满足某种性质 $P(x)$ 的元素 x 的集合，则记为 $S=\{x:P(x)\}$。

下面是与集合运算有关的几个数学符号：

$\forall$ 表示“对所有 $\cdots$”；

$x\in A$ 读作“x 属于集合 A”，意即 x 是集合 A 的一个元素；

$x\notin A$ 表示 x 不是集合 A 的元素；

$\ni$ 代表“使得”；

$\exists$ 意即“存在”；

$A\Rightarrow B$ 表示“若有条件 A，则有结果 B”或“A 意味着 B”。

例如，“在集合 V 中存在一个零元素 θ，使得加法 $x+\theta=x=\theta+x$ 对于 V 中的所有元素 x 均成立”这一冗长的叙述，便可用上述符号简洁地表示为

$$\exists\,\theta\in V \quad \ni \quad x+\theta=x=\theta+x, \quad \forall\, x\in V$$

令 A 和 B 为集合，则集合有以下基本运算。

符号 $A\subseteq B$ 读作“集合 A 包含于集合 B”或“A 是 B 的一个子集”，意指 A 的每一个元素都是 B 的元素，即 $x\in A\Rightarrow x\in B$。

若 $A\subset B$，则称 A 是 B 的一个真子集。符号 $B\supset A$ 读作“B 包含 A”或“B 是 A 的超集 (superset)”。没有任何元素的集合记作 $\varnothing$，称为空集。

符号 $A = B$ 读作“集合 A 等于 B”，意即 $A \subseteq B$ 和 $B \subseteq A$，或 $x \in A \Leftrightarrow x \in B$ (集合 A 的元素一定是集合 B 的元素，反之亦然)。$A = B$ 的否定写作 $A \neq B$，意即 A 不属于 B，反过来 B 也不属于 A。

A 和 B 的并集 (union) 记作 $A \cup B$，定义为

$$X = A \cup B = \{x \in X:\ x \in A \text{ 或 } x \in B\} \tag{1.2.1}$$

它表示并集 X 的元素由属于集合 A 或 B 的元素一起组成。

集合 A 和 B 的交集 (intersection) 用符号 $A \cap B$ 表示，定义为

$$X = A \cap B = \{x \in X:\ x \in A \text{ 和 } x \in B\} \tag{1.2.2}$$

即交集的元素由 A 和 B 共同的元素构成。

符号 $Z = A + B$ 表示集合 A 和 B 的和集，定义为

$$Z = A + B = \{z = x + y \in Z:\ x \in A,\ y \in B\} \tag{1.2.3}$$

即和集的元素由 A 的元素与 B 的元素之和组成。

集合差 (set-theoretic difference) “A 减 B”定义为

$$X = A - B = \{x \in X:\ x \in A,\ \text{但 } x \notin B\} \tag{1.2.4}$$

也称差集。差集也可用符号 $X = A \setminus B$ 表示。

子集合 A 在集合 X 中的补集 (complement) 定义为

$$A^{\mathrm{c}} = X - A = \{x \in X:\ x \notin A\} \tag{1.2.5}$$

若 X 和 Y 为集合，且 $x \in X$ 和 $y \in Y$，则所有有序对 (ordered pair) (x, y) 的集合记为 $X \times Y$，称为集合 X 和 Y 的笛卡儿积，即

$$X \times Y = \{(x, y):\ x \in X,\ y \in Y\} \tag{1.2.6}$$

类似地，$X_1 \times X_2 \times \cdots \times X_n$ 表示 n 个集合 $X_1, X_2, \cdots, X_n$ 的笛卡儿积，其元素为有序 n 元组 (ordered n-ples) $(x_1, x_2, \cdots, x_n)$。

上述集合的有关概念及符号，在本书中将经常用到。

1.2.2 向量空间

定义 1.2.1 [20],[40],[240] 以向量为元素的集合 V 称为向量空间，若加法运算定义为两个向量之间的加法，乘法运算定义为向量与标量域 S 中的标量之间的乘法，并且对于向量集合 V 中的向量 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{w}$ 和标量域 S 中的标量 a_1, a_2，以下两个闭合性和关于加法及乘法的八个公理 (axiom) [也称公设 (postulate) 或定律 (law)] 满足：

闭合性 (closure properties)

(c1) 若 $\boldsymbol{x} \in V$ 和 $\boldsymbol{y} \in V$，则 $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} \in V$，即 V 在加法下是闭合的，简称加法的闭合性 (closure for addition)；

(c2) 若 a_1 是一个标量，$\boldsymbol{y} \in V$，则 $a_1\boldsymbol{y} \in V$，即 V 在标量乘法下是闭合的，简称标量乘法的闭合性 (closure for scalar multiplication)。

加法的公理

(a1) $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} + \boldsymbol{x}$, $\forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$，称为加法的交换律 (commutative law for addition)；

(a2) $\boldsymbol{x} + (\boldsymbol{y} + \boldsymbol{w}) = (\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) + \boldsymbol{w}$, $\forall \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{w} \in V$，称为加法的结合律 (associative law for addition)；

(a3) 在 V 中存在一个零向量 $\boldsymbol{0}$，使得对于任意向量 $\boldsymbol{y} \in V$，恒有 $\boldsymbol{y} + \boldsymbol{0} = \boldsymbol{y}$ (零向量的存在性)；

(a4) 给定一个向量 $\boldsymbol{y} \in V$，存在另一个向量 $-\boldsymbol{y} \in V$ 使得 $\boldsymbol{y} + (-\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{0} = (-\boldsymbol{y}) + \boldsymbol{y}$ (负向量的存在性)。

标量乘法的公理

(s1) $a(b\boldsymbol{y}) = (ab)\boldsymbol{y}$ 对所有向量 $\boldsymbol{y}$ 和所有标量 a, b 成立，称为标量乘法的结合律 (associative law for scalar multiplication)；

(s2) $a(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) = a\boldsymbol{x} + a\boldsymbol{y}$ 对所有向量 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$ 和标量 a 成立，称为标量乘法的分配律 (distributive law for scalar multiplication)；

(s3) $(a + b)\boldsymbol{y} = a\boldsymbol{y} + b\boldsymbol{y}$ 对所有向量 $\boldsymbol{y}$ 和所有标量 a, b 成立 (标量乘法的分配律)；

(s4) $1\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}$ 对所有 $\boldsymbol{y} \in V$ 成立，称为标量乘法的单位律 (unity law for scalar multiplication)。

由于向量空间服从向量加法的交换律、结合律以及标量乘法的结合律、分配律，所以定义 1.2.1 给出的向量空间为线性空间。

如果 V 中的向量为实向量，并且标量域为实数域，则称 V 是实向量空间。若 V 中的向量为复向量，且标量域为复数域，便称 V 为复向量空间。

如下面的定理所归纳的那样，向量空间还有其他一些有用的性质。

定理 1.2.1 如果 V 是一个向量空间，则

(1) 零向量 $\boldsymbol{0}$ 是唯一的。

(2) 对每一个向量 $\boldsymbol{y}$，加法的逆运算 $-\boldsymbol{y}$ 是唯一的。

(3) 对每一个向量 $\boldsymbol{y}$，恒有 $0\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$。

(4) 对每一个标量 a，恒有 $a\boldsymbol{0} = \boldsymbol{0}$。

(5) 若 $a\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$，则 $a = 0$ 或者 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$。

(6) $(-1)\boldsymbol{y} = -\boldsymbol{y}$。

证明 参见文献 [240, pp.365~366]。

R^n 和 C^n 是向量空间最重要的两个例子。

对于一个正整数 n，实数的所有有序 n 元组 $[x_1, x_2, \cdots, x_n]$ 的集合记为 R^n，它的每一个元素称为向量 (均为 $n \times 1$ 向量)。特别地，若 $n = 1$，则 R 的元素称为标量。如果对集合 R^n 定义两个向量的加法和一个标量与一个向量的乘法，则称 R^n 为 n 阶实向量空间。

类似地，若在复数的所有有序 n 元组的集合 C^n 内定义向量加法和标量乘法，则称 C^n 为 n 阶复向量空间。

在很多场合，我们并不对 n 阶向量空间 R^n 或者 C^n 中所有的向量组合感兴趣，而只是关心向量空间中某个特定的向量子集合 W。以 R^3 的子集合为例：

$$W = \{\boldsymbol{x} : \boldsymbol{x} = [x_1, x_2, 0]^{\mathrm{T}}, \quad x_1 \text{ 和 } x_2 \text{ 为实数}\}$$

从几何的观点看，R^3 是一个三维空间，而 W 是二维 x-y 平面，可以用 R^2 表示。

定义 1.2.2 令 V 和 W 是两个向量空间，若 W 是 V 中一个非空的子集合，则称子集合 W 是 V 的一个子空间。

显然，一个 n 维零向量是 n 阶向量空间的一个子空间。在本书中，假定子空间 W 是非空的，零向量只是子集合 W 中的一个元素，而非唯一的元素。

下面的定理提供了确定 R^n 的子集合 W 是否为 R^n 的子空间的一种简便方法。

定理 1.2.2 R^n 的子集合 W 是 R^n 的子空间，当且仅当以下三个条件满足：

(1) 每当向量 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}$ 属于 W，则 $\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}$ 也属于 W，即满足加法的闭合性：

$$\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in W \ \Rightarrow \ (\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}) \in W$$

(2) 每当向量 $\boldsymbol{x}$ 属于 W，且 a 为标量时，则 $a\boldsymbol{x}$ 属于 W，即满足与标量乘积的闭合性。

(3) 零向量 $\mathbf{0}$ 是 W 的元素。

证明[240, p.169] 充分性证明。假定 W 是满足上述条件 (1) 和 (2) 的 R^n 的子集合。为了证明 W 是 R^n 的子空间，必须证明 W 满足向量空间的 10 个基本性质 (定义 1.2.1)。条件 (1) 和 (2) 意味着子集合 W 满足定义 1.2.1 中的性质 (c1) 和 (c2)。注意到 W 是 V 的子集合，所以 W 也满足定义 1.2.1 中的性质 (a1)，(a2)，(s1)，(s2)，(s3) 和 (s4)。由于非空的子集合包含零向量，故 (a3) 满足。容易看出 $-\boldsymbol{x} = (-1)\boldsymbol{x}$。因此，如果 $\boldsymbol{x} \in W$，则由条件 (2) 知 $-\boldsymbol{x} \in W$，即定义 1.2.1 中的基本性质 (a4) 也满足。由于 W 满足定义 1.2.1 中的 10 个基本性质，故 W 是 R^n 的子空间。

必要性证明。令 W 是 R^n 的子空间，则性质 (a3) 意味着零向量是子空间 W 的一个元素。另外，子空间满足性质 (c1) 和 (c2)，意味着条件 (1) 和 (2) 在 W 中成立。 ■

定义 1.2.3 若 A 和 B 是向量空间 V 的两个向量子空间，则

$$A + B = \{\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y} : \ \boldsymbol{x} \in A, \ \boldsymbol{y} \in B\} \tag{1.2.7}$$

称为子空间 A 和 B 的和，而

$$A \cap B = \{\boldsymbol{x} \in V : \ \boldsymbol{x} \in A \text{ 及 } \boldsymbol{x} \in B\} \tag{1.2.8}$$

称为子空间 A 和 B 的交。

定义 1.2.4 若 A 和 B 是向量空间 V 的两个子空间，并满足 $V = A+B$ 和 $A\cap B = \{\mathbf{0}\}$，则称 V 是子空间 A 和 B 的直接求和，简称直和 (direct sum)，记作 $V = A\oplus B$。

定理 1.2.3 若 A 和 B 是向量空间 V 的向量子空间，则 $A+B$ 和 $A\cap B$ 也是 V 的向量子空间。

证明 由于向量子空间 A 和 B 都包含零向量，故 $\mathbf{0} = \mathbf{0}+\mathbf{0}$ 表明 $A+B$ 也包含零向量。若 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}' \in A$ 和 $\boldsymbol{y},\boldsymbol{y}' \in B$，且 c 为标量，则 $(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y})+(\boldsymbol{x}'+\boldsymbol{y}') = (\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}')+(\boldsymbol{y}+\boldsymbol{y}') \in A+B$ (因为子空间 A 和 B 分别满足加法的闭合性) 且 $c(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}) = c\boldsymbol{x}+c\boldsymbol{y} \in A+B$ (因为子空间 A 和 B 均具有与标量乘法的闭合性)。这说明 $A+B$ 也具有加法的闭合性和与标量乘法的闭合性，即 $A+B$ 满足定理 1.2.2 的 3 个条件。因此，$A+B$ 是向量子空间。类似地，可以证明 $A\cap B$ 也是向量子空间。 ■

推论 1.2.1 若 A 和 B 是向量空间 V 的子空间，则 $A+B$ 是 V 中包含向量子空间 A 和 B 的最小向量子空间。

推论 1.2.2 若 A 和 B 是向量空间 V 的子空间，则子空间的交 $A\cap B$ 是 V 中既属于 A，又属于 B 的最大向量子空间。

以上两个推论的证明参见文献 [40]。

1.2.3 实内积空间

向量空间只定义了向量的加法以及标量与向量的乘法，并且向量空间的和、交与直和等也只涉及两个向量空间的元素 (即向量) 之间比较简单的关系。虽然这些运算非常重要，但对向量和矩阵的更复杂的有关运算便显得明显不够。因此，需要对向量空间中的向量定义其他运算。最自然的联想是应该增加关于两个向量之间的内部乘积 (简称内积) 的定义。这就引出了内积空间的概念。这里先介绍实内积空间，下一小节再讨论复内积空间。

定义 1.2.5 实内积空间 (real inner product space) 是满足下列条件的实向量空间 E，即对 E 中每一对向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$，存在向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的内积 $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$ 服从以下公理：

(1) $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle > 0,\ \forall\ \boldsymbol{x}\neq\mathbf{0}$，称为内积的严格正性 (strict positivity) 或称内积是正定的 (positive definite)，并且 $\langle\boldsymbol{x}, \text{boldmath}\ x\rangle = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{x} = \mathbf{0}$；

(2) $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle = \langle\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}\rangle$，称为内积的对称性 (symmetry)；

(3) $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z}\rangle = \langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle + \langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}\rangle,\ \forall\ \boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}$；

(4) $\langle\alpha\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle = \alpha\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$ 对所有实向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 及所有实标量 α 成立。

如果对实 n 阶向量空间 R^n 定义向量 $\boldsymbol{x} = [x_1,x_2,\cdots,x_n]^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{y} = [y_1,y_2,\cdots,y_n]^{\mathrm{T}}$ 之间的内积为典范内积 (canonical inner product)

$$\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i \tag{1.2.9}$$

则称 R^n 为 n 阶 Euclidean 空间或者 Euclidean n 空间。由于向量内积通常采用上述定义，所以在一般情况下，常使用符号 R^n 表示 Euclidean n 空间。

令 $x(t), y(t)$ 是 R 的两个连续函数，并且 t 的定义域为 $[a,b]$，则 $x(t)$ 和 $y(t)$ 之间的内积定义为

$$\langle x(t), y(t)\rangle \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b x(t)y(t)\mathrm{d}t \tag{1.2.10}$$

可以验证，该内积满足内积的四个公理，所以 R 是一维内积空间。但是，由于这个空间不是有限维的，所以它不是 Euclidean 空间。

范数是另一种重要的向量运算，它与内积密切相关。

定义 1.2.6 若 R^n 是一个实内积空间，并且 $\boldsymbol{x} \in E^n$，则 $\boldsymbol{x}$ 的范数 (或"长度") 记作 $\|\boldsymbol{x}\|$，并定义为

$$\|\boldsymbol{x}\| = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}\rangle^{1/2} \tag{1.2.11}$$

长度为 1 的向量称为单位向量 (unit vector)。向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 之间的距离定义为

$$d = \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\| = \langle \boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\rangle^{1/2} \tag{1.2.12}$$

特别地，对于 Euclidean n 空间，向量范数取

$$\|\boldsymbol{x}\|_2 = \sqrt{a_1^2 + a_2^2 + \cdots + a_n^2} \tag{1.2.13}$$

并称为向量 $\boldsymbol{x}$ 的 Euclidean 长度；而向量的距离则取

$$\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|_2 = \sqrt{(a_1 - b_1)^2 + (a_2 - b_2)^2 + \cdots + (a_n - b_n)^2} \tag{1.2.14}$$

并称之为向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 之间的 Euclidean 距离。

下面是实内积空间的范数具有的一般性质。

定理 1.2.4 在实内积空间里，范数具有以下性质：

(1) $\|\boldsymbol{0}\| = 0$，并且 $\|\boldsymbol{x}\| > 0,\ \forall\, \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$；

(2) $\|c\boldsymbol{x}\| = |c|\|\boldsymbol{x}\|$ 对所有向量 $\boldsymbol{x}$ 和标量 c 成立；

(3) 范数服从极化恒等式 (polarization identity)

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle = \frac{1}{4}\left(\|\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}\|^2 - \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|^2\right), \quad \forall\, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \tag{1.2.15}$$

(4) 范数满足平行四边形法则 (parallelogram law)

$$\|\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}\|^2 + \|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{y}\|^2 = 2\|\boldsymbol{x}\|^2 + 2\|\boldsymbol{y}\|^2, \quad \forall\, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \tag{1.2.16}$$

(5) 范数服从 Cauchy-Schwartz 不等式

$$|\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle| \leqslant \|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\| \tag{1.2.17}$$

等号 $|\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle| = \|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$ 成立，当且仅当 $\boldsymbol{y} = c\boldsymbol{x}$，其中，$c$ 为某个非零常数。

(6) 范数满足三角不等式

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|, \quad \forall\, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \tag{1.2.18}$$

证明 根据范数的定义，性质 (1) 显然成立。由于 $\|c\boldsymbol{x}\|^2=\langle c\boldsymbol{x}, c\boldsymbol{x}\rangle=c^2\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}\rangle=|c|^2\|\boldsymbol{x}\|^2$，故立即有 $\|c\boldsymbol{x}\|=|c|\|\boldsymbol{x}\|$，性质 (2) 成立。

性质 (3) 和 (4) 的证明：由范数的定义以及内积的公理，易知

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 &= \langle\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\rangle=\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\rangle+\langle\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\rangle \\
&= \langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle+\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle+\langle\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}\rangle+\langle\boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}\rangle \\
&= \|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2+2\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle
\end{aligned}$$

在上式中用 $-\boldsymbol{y}=(-1)\boldsymbol{y}$ 代替 $\boldsymbol{y}$，即有

$$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2=\|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2-2\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle$$

分别将以上两式相减和相加，分别有

$$\begin{aligned}
&\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2-\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2=4\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle \\
&\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2+\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2=2\left(\|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2\right)
\end{aligned}$$

以上两式即分别是极化恒等式和平行四边形法则。

性质 (5) 的证明：若 $\boldsymbol{x}=\mathbf{0}$ 或者 $\boldsymbol{y}=\mathbf{0}$，则由于 $\|\mathbf{0}\|=0$，故 Cauchy-Schwartz 不等式显然成立。现假设 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 都不是零向量。令 $\boldsymbol{u}=\|\boldsymbol{x}\|^{-1}\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{v}=\|\boldsymbol{y}\|^{-1}\boldsymbol{y}$，则易知 $\|\boldsymbol{u}\|=1$ 和 $\|\boldsymbol{v}\|=1$，并且

$$\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle=\langle\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{u}, \|\boldsymbol{y}\|\boldsymbol{v}\rangle=\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|\langle\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}\rangle$$

下面证明 $\langle\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}\rangle \leqslant 1$：由极化恒等式和平行四边形法则，得

$$\langle\boldsymbol{u}, \boldsymbol{v}\rangle \leqslant \frac{1}{4}\left(\|\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}\|^2+\|\boldsymbol{u}-\boldsymbol{v}\|^2\right)=\frac{1}{4}\left(2\|\boldsymbol{u}\|^2+2\|\boldsymbol{v}\|^2\right)=1$$

因为 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 分别是长度为 1 的向量。因此，Cauchy-Schwartz 不等式成立。若 $\boldsymbol{y}=c\boldsymbol{x}$，则 $|\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle|=|\langle\boldsymbol{x}, c\boldsymbol{x}\rangle|=|c|\|\boldsymbol{x}\|^2=\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$，即当 $\boldsymbol{y}=c\boldsymbol{x}$ 时，Cauchy-Schwartz 不等式中的等号成立，充分性得证。反之，令 $|\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle|=\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$。若 $\boldsymbol{y}\neq c\boldsymbol{x}$，则 $|\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle|\neq|\langle\boldsymbol{x}, c\boldsymbol{x}\rangle|=|c|\|\boldsymbol{x}\|^2=\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$，与假设 $|\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle|=\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$ 相矛盾。因此，Cauchy-Schwartz 不等式的等号成立的必要性得证。

性质 (6) 的证明：由前面的结果 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2=\|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2+2\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle$ 和 $\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle \leqslant |\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle|$ 知

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 \leqslant \|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2+2|\langle\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle|$$

对上式运用 Cauchy-Schwartz 不等式，立即知

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 \leqslant \|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2+2\|\boldsymbol{x}\|\,\|\boldsymbol{y}\|=(\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|)^2$$

此即三角不等式。 ■

1.2.4 复内积空间

现在讨论复内积空间。

定义 1.2.7 复内积空间 (complex inner product space) 是满足下列条件的复向量空间 C：对 C 中每一对向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$，存在复向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 之间的内积 $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$ 服从以下公理：

(1) $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}\Rightarrow\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle>0$，称为内积的严格正性或称内积是正定的；

(2) $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle^*=\langle\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}\rangle$，称为内积的共轭对称性 (conjugate symmetry) 或 Hermitian 性；

(3) $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}+\boldsymbol{z}\rangle=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle+\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{z}\rangle$，对所有向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y},\boldsymbol{z}$ 成立；

(4) $\langle c\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=c^*\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$ 对所有复向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 及所有复标量 c 成立。

一个有限维的复内积空间内的复向量 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_n]^{\mathrm{T}},\boldsymbol{y}=[y_1,y_2,\cdots,y_n]^{\mathrm{T}}$ 之间的内积通常采用复向量的典范内积表示，即

$$\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=\sum_{i=1}^{n}x_i^*y_i \tag{1.2.19}$$

因此，在一般文献中，常使用符号 C^n 表示具有上述典范内积定义的 n 维复内积空间。

与实内积空间一样，复内积空间 C^n 内向量 $\boldsymbol{x}$ 的范数 $\|\boldsymbol{x}\|$ 也定义为 $\|\boldsymbol{x}\|=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle^{1/2}$。类似地，若 $\|\boldsymbol{x}\|=1$，则称 $\boldsymbol{x}$ 为单位长度向量。对于复内积空间 C^n 的每一对向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$，它们之间的距离定义为 $\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$。

下面是复内积空间的常用范数性质。需要注意的是，复内积空间和实内积空间的某些范数性质有所不同。

定理 1.2.5 在复内积空间里，范数具有以下性质：

(1) $\|\boldsymbol{0}\|=0$; $\|\boldsymbol{x}\|>0,\ \forall\,\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$;

(2) $\|c\boldsymbol{x}\|=|c|\|\boldsymbol{x}\|$，其中，$|c|$ 表示复数 c 的模；

(3) 极化恒等式

$$\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=\frac{1}{4}\left(\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2-\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2-\mathrm{j}\,\|\boldsymbol{x}+\mathrm{j}\,\boldsymbol{y}\|^2+\mathrm{j}\|\boldsymbol{x}-\mathrm{j}\,\boldsymbol{y}\|^2\right) \tag{1.2.20}$$

(4) 平行四边形法则

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2+\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2=2\|\boldsymbol{x}\|^2+2\|\boldsymbol{y}\|^2 \tag{1.2.21}$$

(5) Cauchy-Schwartz 不等式 $|\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle|\leqslant\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$，等式 $|\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle|=\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$ 成立，当且仅当 $\boldsymbol{y}=c\boldsymbol{x}$，其中，$c$ 为某个复数；

(6) 三角不等式 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|\leqslant\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$。

证明 [40, p.288] 与定理 1.2.4 (实内积空间的范数性质) 的公式相比，定理 1.2.5 中只有极化恒等式不同。因此，这里只证明极化恒等式，其他性质的证明与定理 1.2.4 类似。利用复内积空间关于内积的公理易知

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2=\|\boldsymbol{x}\|^2+\|\boldsymbol{y}\|^2+\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle+\langle\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}\rangle \tag{1}$$

在上式中用 $-\boldsymbol{y}$ 代替 $\boldsymbol{y}$，然后乘以 -1，得

$$-\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2 = -\|\boldsymbol{x}\|^2 - \|\boldsymbol{y}\|^2 + \langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle + \langle\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}\rangle \tag{2}$$

在式 (1) 中用 $\mathrm{j}\,\boldsymbol{y}$ 代替 $\boldsymbol{y}$，然后两边同乘以 $-\mathrm{j}$，则有

$$-\mathrm{j}\,\|\boldsymbol{x}+\mathrm{j}\,\boldsymbol{y}\|^2 = -\mathrm{j}\,\|\boldsymbol{x}\|^2 - \mathrm{j}\,\|\boldsymbol{y}\|^2 + \langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle - \langle\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}\rangle \tag{3}$$

在式 (3) 两边同乘以 -1，并且用 $-\boldsymbol{y}$ 代替 $\boldsymbol{y}$，即得

$$\mathrm{j}\,\|\boldsymbol{x}-\mathrm{j}\,\boldsymbol{y}\|^2 = \mathrm{j}\,\|\boldsymbol{x}\|^2 + \mathrm{j}\,\|\boldsymbol{y}\|^2 + \langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle - \langle\boldsymbol{y},\boldsymbol{x}\rangle \tag{4}$$

将式 (1) ~ 式 (4) 相加，立即有

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 - \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2 - \mathrm{j}\,\|\boldsymbol{x}+\mathrm{j}\,\boldsymbol{y}\|^2 + \mathrm{j}\,\|\boldsymbol{x}-\mathrm{j}\,\boldsymbol{y}\|^2 = 4\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$$

此即是极化恒等式。 ■

顺便指出，在有些书 (如文献 [40] 等) 中，复向量的内积定义为

$$\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i y_i^*$$

此时，极化恒等式变为

$$\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle = \frac{1}{4}\left(\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 - \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2 + \mathrm{j}\,\|\boldsymbol{x}+\mathrm{j}\,\boldsymbol{y}\|^2 - \mathrm{j}\|\boldsymbol{x}-\mathrm{j}\,\boldsymbol{y}\|^2\right)$$

这一点希望引起注意。

1.2.5 线性映射

以上讨论了向量空间内向量的有关运算：向量加法、向量与标量的乘法、两个向量之间的内积以及向量的范数，但尚未涉及两个向量空间之间的转换关系。然而，在技术科学、社会科学和数学的一些分支中，不同向量空间内向量之间的线性变换起着重要的作用。因此，为了研究两个向量空间之间的关系，有必要考虑能够实现从一个向量空间到另一个向量空间的转换关系的函数。事实上，在我们的日常生活中，也经常遇到这种转换。当我们欲将一幅图像变换为另一幅图像时，通常会移动它的位置，或者旋转它。例如，函数 $T(x,y)=(\alpha x,\beta y)$ 就能够将图像的 x 坐标和 y 坐标改变尺度。根据 α 和 β 大于 1 还是小于 1，图像就能够被放大或者缩小。

下面从线性映射的角度，对向量空间的结构作一番讨论。

映射本身就是一类函数，因此常使用一般函数通用的符号来表示映射。若令 V 是 Euclidean m 空间 R^m 的子空间，W 是 R^n 的子空间，则

$$T: V \mapsto W \tag{1.2.22}$$

称为子空间 V 到子空间 W 的映射 (或函数、变换)，它表示将子空间 V 的每一个向量变成子空间 W 的一个相对应向量的一种规则。于是，若 $\boldsymbol{v} \in V$ 和 $\boldsymbol{w} \in W$，则向量 $\boldsymbol{w}$ 是 $\boldsymbol{v}$ 的映射或变换，即有

$$\boldsymbol{w} = T(\boldsymbol{v}) \tag{1.2.23}$$

并称子空间 V 是映射 T 的始集 (initial set) 或域 (domain)，称 W 是 T 的终集 (final set) 或上域 (codomain)。

若 $\boldsymbol{v}$ 是向量空间 V 的某个向量，则 $T(\boldsymbol{v})$ 称为向量 $\boldsymbol{v}$ 在映射 T 下的像 (image)，或映射 T 在点 $\boldsymbol{v}$ 的值 (value)，而 $\boldsymbol{v}$ 称为 $T(\boldsymbol{v})$ 的原像。对于向量空间 V 的子空间 A，映射 $T(A)$ 表示子空间 A 的元素 (即向量) 在映射 T 下的值的集合，写作

$$T(A) = \{T(\boldsymbol{v}):\ \boldsymbol{v} \in A\} \tag{1.2.24}$$

特别地，$T(V)$ 代表对 V 内所有向量的变换输出的集合，称为映射 T 的值域 (range)，其符号为

$$T(V) = \mathrm{Im}(T) = \{T(\boldsymbol{v}:\ \boldsymbol{v} \in V)\} \tag{1.2.25}$$

一般地，映射 $T: V \mapsto W$ 的值域 $\mathrm{Im}(T)$ 是 W 的一个子集合。如果 $\mathrm{Im}\,(T) = W$，即映射的值域等于向量空间 W，则称 $T: V \mapsto W$ 为满射 (surjective)。映射 $T: V \mapsto W$ 称为单 (值映) 射 (injective)，若它将 V 的不同向量映射为 W 的不同向量，即

$$\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2 \in V,\ \boldsymbol{v}_1 \neq \boldsymbol{v}_2 \quad \Rightarrow \quad T(\boldsymbol{v}_1) \neq T(\boldsymbol{v}_2)$$

或者

$$T(\boldsymbol{v}_1) = T(\boldsymbol{v}_2) \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{v}_1 = \boldsymbol{v}_2$$

特别地，若映射 $T: V \mapsto W$ 既是单射，又是满射，则称之为一对一映射 (bijective)。一个一对一映射 $T: V \mapsto W$ 存在逆映射 $T^{-1}: W \mapsto V$。逆映射 T^{-1} 的任务就是将映射 T 所做过的每一件事情恢复原状。因此，若 $T(\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{w}$，则 $T^{-1}(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{v}$。其结果是，$T^{-1}(T(\boldsymbol{v})) = \boldsymbol{v}$, $\forall\, \boldsymbol{v} \in V$ 和 $T(T^{-1}(\boldsymbol{w})) = \boldsymbol{w}$, $\forall\, \boldsymbol{w} \in W$。

矩阵与向量的乘法 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1}$ 也可视为将 C^n 的向量 $\boldsymbol{x}$ 变换为 C^m 的某个向量 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的映射 $T: \boldsymbol{x} \mapsto \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，故矩阵与一向量的乘法常称为该向量的矩阵变换 (matrix transformation)。

考察线性变换 $\boldsymbol{y} = T(\boldsymbol{x}) = r\boldsymbol{x}$。当 $0 \leqslant r \leqslant 1$ 时，称线性变换 $T(\boldsymbol{x}) = r\boldsymbol{x}$ 为压缩映射 (contracting mapping)，因为 T 在 $\boldsymbol{x}$ 的像点 $r\boldsymbol{x}$ 的向量长度小于 $\boldsymbol{x}$ 的长度。相反，若 $r > 1$，则称 $T(\boldsymbol{x}) = r\boldsymbol{x}$ 为膨胀映射 (dilation mapping)，因为 $r\boldsymbol{x}$ 是将 $\boldsymbol{x}$ 拉长的结果。

例 1.2.1 下面是两个变换 $T: R^3 \mapsto R^2$：

$$T_1(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} x_1 + x_2 \\ x_1^2 - x_2^2 \end{bmatrix}, \quad 其中，\ \boldsymbol{x} = [x_1, x_2, x_3]^{\mathrm{T}}$$

$$T_2(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} x_1 - x_2 \\ x_2 + x_3 \end{bmatrix}, \quad 其中，\ \boldsymbol{x} = [x_1, x_2, x_3]^{\mathrm{T}}$$

定义 1.2.8 令 V 和 W 分别是 R^m 和 R^n 的子空间，并且 $T: V \mapsto W$ 是一映射。称 T 为线性映射或线性变换，若对于 $\boldsymbol{v} \in V, \boldsymbol{w} \in W$ 和所有标量 c，映射 T 满足线性关系式

$$T(\boldsymbol{v}+\boldsymbol{w}) = T(\boldsymbol{v}) + T(\boldsymbol{w}) \tag{1.2.26}$$

和

$$T(c\boldsymbol{v}) = cT(\boldsymbol{v}) \tag{1.2.27}$$

定义中的两个条件也可合并写作

$$T(c_1\boldsymbol{v} + c_2\boldsymbol{w}) = c_1T(\boldsymbol{v}) + c_2T(\boldsymbol{w}) \tag{1.2.28}$$

更一般地，若 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p$ 均为线性变换 T 的域，并反复使用式 (1.2.28)，则可以得到

$$T(c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + c_p\boldsymbol{u}_p) = c_1T(\boldsymbol{u}_1) + c_2T(\boldsymbol{u}_2) + \cdots + c_pT(\boldsymbol{u}_p) \tag{1.2.29}$$

这一公式在工程和物理中被称为叠加原理 (superposition principle)。如果 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p$ 分别为某个系统或过程的输入信号向量，则 $T(\boldsymbol{u}_1), T(\boldsymbol{u}_2), \cdots, T(\boldsymbol{u}_p)$ 可分别视为该系统或过程的输出信号向量。判断一个系统是否为线性系统的判据是：如果系统的输入为线性表达式 $\boldsymbol{y} = c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + c_p\boldsymbol{u}_p$，则当系统的输出也满足相同的线性关系 $T(\boldsymbol{y}) = T(c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + c_p\boldsymbol{u}_p) = c_1T(\boldsymbol{u}_1) + c_2T(\boldsymbol{u}_2) + \cdots + c_pT(\boldsymbol{u}_p)$ 时，该系统为线性系统。否则，为非线性系统。

容易看出，例 1.2.1 的变换 $T_1: R^3 \mapsto R^2$ 不满足线性关系式，故不是线性变换；而变换 $T_2: R^3 \mapsto R^2$ 满足线性关系式，为线性变换。

例 1.2.2 考查矩阵变换 $T(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，容易验证

$$T(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = T(\boldsymbol{x}) + T(\boldsymbol{y}) \tag{1.2.30}$$

$$T(c\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}(c\boldsymbol{x}) = c\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = cT(\boldsymbol{x}) \tag{1.2.31}$$

式中，c 为常数。因此，矩阵变换 $T(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 是向量 $\boldsymbol{x}$ 的线性变换。

例 1.2.3 线性变换 $T: R^n \mapsto R^m$ 可以用线性方程

$$\begin{aligned} w_1 &= a_{11}x_1 + a_{12}x_2 + \cdots + a_{1n}x_n \\ w_2 &= a_{21}x_1 + a_{22}x_2 + \cdots + a_{2n}x_n \\ &\cdots \\ w_m &= a_{m1}x_1 + a_{m2}x_2 + \cdots + a_{mn}x_n \end{aligned}$$

描述，或使用矩阵符号表示为

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} \tag{1.2.32}$$

或简记作

$$\boldsymbol{w}=T(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \tag{1.2.33}$$

式中，$\boldsymbol{A}$ 称为线性变换 T 的标准矩阵 (standard matrix)。线性变换 $T(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 也称矩阵变换。

例 1.2.4 考虑线性算子 $T: R^2 \mapsto R^2$，它将平面上的向量 $\boldsymbol{x}$ 映射为 y 轴上的正交投影 $\boldsymbol{w}$，参见图 1.2.1。这一线性算子称为正交投影算子。

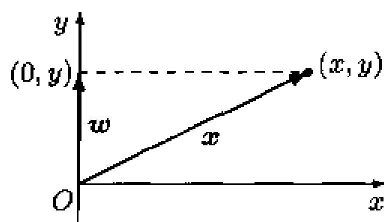


图 1.2.1 正交投影

由图 1.2.1，可以写出与 $\boldsymbol{w}=T(\boldsymbol{x})$ 的分量相关的方程为

$$w_1=0=0x+0y$$

$$w_2=y=0x+1y$$

或写成矩阵形式

$$\begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \end{bmatrix}=\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}$$

由于是线性方程，所以正交投影算子 $T(\boldsymbol{x})$ 为线性变换，相应的标准矩阵为

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

例 1.2.5 前面介绍过的向量内积也是一种线性映射。以复内积空间的典范内积

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle=\sum_{i=1}^{n} x_i^* y_i,\ \forall\ \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$$

为例，显然它是一种将笛卡儿积 $V \times V=\{(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}):\ \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V\}$ 变换到复域 C 的映射 $T: V \times V \mapsto C$，即

$$T: V \times V \mapsto C \overset{\text{def}}{=} \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle$$

根据内积公理易知，映射 $T: V \times V$ 满足线性变换的两个条件，故为线性映射。

线性子空间和线性映射都与向量空间的结构有关，不难想象线性子空间和线性映射之间一定存在某种内在联系。这种关系可以用下面的定理描述。

定理 1.2.6 令 V 和 W 是两个向量空间，$T: V \mapsto W$ 为一线性变换。

(1) 若 M 是 V 的线性子空间，则 $T(M)$ 是 W 的线性子空间；

(2) 若 N 是 W 的线性子空间，则线性反变换 $T^{-1}(N)$ 是 V 的线性子空间。

证明　参见文献 [40, p.29]。

线性映射具有以下基本性质：若 $T: V \mapsto W$ 是一线性映射，则

$$T(\mathbf{0}) = \mathbf{0} \tag{1.2.34}$$

$$T(-\boldsymbol{x}) = -T(\boldsymbol{x}) \tag{1.2.35}$$

证明　由于 T 是线性映射，故 $T(\mathbf{0}) = T(\mathbf{0}+\mathbf{0}) = T(\mathbf{0}) + T(\mathbf{0})$。由此得 $T(\mathbf{0}) = \mathbf{0}$。又因为 $\mathbf{0} = T(\mathbf{0}) = T(\boldsymbol{x} + (-\boldsymbol{x})) = T(\boldsymbol{x}) + T(-\boldsymbol{x})$，立即知 $T(-\boldsymbol{x}) = -T(\boldsymbol{x})$。 ■

两个具有相同结构的向量空间 E 和 F 称为同构 (isomorphic)，记作 $E \cong F$。两个实 (或复) 内积空间 E 和 F 同构，若存在一个一对一线性映射 $T: E \mapsto F$ 能保持向量的内积不变，即 $\langle T\boldsymbol{x}, T\boldsymbol{y}\rangle = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle$ 对所有向量 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in E$ 成立。这样一种映射 T 称为向量空间的同构映射 (isomorphism)。

1.3 随机向量

在概率论中，常称 ω 为基本事件，$A(\in \mathcal{F})$ 为事件，$\mathcal{F}$ 是事件的全体，而 $P(A)$ 称为事件的概率。

考虑概率空间 $(\Omega, \mathcal{F}, P)$。用 $L_p = L_p(\Omega, \mathcal{F}, P)$ 表示随机变量 $\xi = \xi(\omega)$ 的空间，其中，$\mathrm{E}\{|\xi|^p\} = \int_\Omega |\xi|^p \mathrm{d}p < \infty$，称 $L_p(p > 1)$ 为 Banach 空间。在 Banach 空间中，起重要作用的是空间 $L_2 = L_2(\Omega, \mathcal{F}, P)$。这种空间就是具有有限二阶矩 $\mathrm{E}\{\xi^2\} < \infty$ 的随机变量的 Hilbert 空间，简称为 L_2 空间。只研究向量空间中一阶和二阶统计性质的理论称为 L^2 理论。

另一方面，在信号处理、自动控制、通信、电子工程、神经网络等应用中，观测数据和加性噪声通常取随机变量。由随机变量组成的向量称为随机向量。本节介绍随机向量的 L^2 理论，先讨论实随机向量，然后再推广到复随机向量。

1.3.1 概率密度函数

描述随机向量的统计函数有累积分布函数、概率密度函数、均值函数和协方差函数等。先讨论随机向量的累积分布函数和概率密度函数。

1. 实随机向量的概率密度函数

一个含有 m 个随机变量的实值向量

$$\boldsymbol{x}(\xi) = [x_1(\xi), x_2(\xi), \cdots, x_m(\xi)]^{\mathrm{T}} \tag{1.3.1}$$

称为 $m \times 1$ 实随机向量，或简称随机向量 (当维数无关紧要时)。其中，ξ 表示样本点，例如它可以是时间 t，圆频率 f，角频率 ω 或位置 s 等。

一个随机向量所有元素的联合累积分布函数常用符号 $F_{\boldsymbol{x}}(x_1,x_2,\cdots,x_m)$ 表示，联合概率密度函数常用 $f_{\boldsymbol{x}}(x_1,x_2,\cdots,x_m)$ 作符号。为了简化，令 $F(\boldsymbol{x})=F_{\boldsymbol{x}}(x_1,x_2,\cdots,x_m)$ 和 $f(\boldsymbol{x})=f_{\boldsymbol{x}}(x_1,x_2,\cdots,x_m)$。一个随机向量由它的联合累积分布函数或联合概率密度函数完全描述。一组概率的集合函数

$$F(\boldsymbol{x}) \stackrel{\text{def}}{=} P\{\xi : x_1(\xi)\leqslant x_1, x_2(\xi)\leqslant x_2,\cdots,x_m(\xi)\leqslant x_m\} \tag{1.3.2}$$

定义为向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 的联合累积分布函数，简称分布函数。式中，x_i 为实数。

随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 的 (联合) 概率密度函数定义为

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{x}) &\stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\Delta x_1\to 0,\cdots,\Delta x_m\to 0}\frac{P\{\xi : x_1 < x_1(\xi)\leqslant x_1+\Delta x_1,\cdots,x_m < x_m(\xi)\leqslant x_m+\Delta x_m\}}{\Delta x_1\cdots\Delta x_m} \\ &= \frac{\partial^m}{\partial x_1\partial x_2\cdots\partial x_m}F_{\boldsymbol{x}}(x_1,x_2,\cdots,x_m) \end{aligned} \tag{1.3.3}$$

联合概率密度函数的 $m-1$ 重积分函数

$$f(x_i) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{\infty}\cdots\int_{-\infty}^{\infty} f_{\boldsymbol{x}}(x_1,x_2,\cdots,x_m)\mathrm{d}x_1\cdots\mathrm{d}x_{i-1}\mathrm{d}x_{i+1}\cdots\mathrm{d}x_m \tag{1.3.4}$$

称为随机变量 x_i 的边缘概率密度函数。

由式 (1.3.4) 和式 (1.3.2) 易知

$$F(\boldsymbol{x}) = \int_{-\infty}^{x_1}\cdots\int_{-\infty}^{x_m} f_{\boldsymbol{v}}(v_1,\cdots,v_m)\mathrm{d}v_1\cdots\mathrm{d}v_m \tag{1.3.5}$$

就是说，随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 的联合分布函数等于其联合概率密度函数的积分。

定义1.3.1 [353] 随机变量 $x_1(\xi),x_2(\xi),\cdots,x_m(\xi)$ 称为 (联合) 独立，若对于 m 个事件 $\{x_1(\xi)\leqslant x_1\},\{x_2(\xi)\leqslant x_2\},\cdots,\{x_m(\xi)\leqslant x_m\}$，有概率关系

$$P\{x_1(\xi)\leqslant x_1,\cdots,x_m(\xi)\leqslant x_m\} = P\{x_1(\xi)\leqslant x_1\}\cdots P\{x_m(\xi)\leqslant x_m\} \tag{1.3.6}$$

成立。这意味着

$$F(\boldsymbol{x}) = F_{\boldsymbol{x}}(x_1,x_2,\cdots,x_m) = F_{x_1}(x_1)F_{x_2}(x_2)\cdots F_{x_m}(x_m) \tag{1.3.7}$$

或

$$f(\boldsymbol{x}) = f_{\boldsymbol{x}}(x_1,x_2,\cdots,x_m) = f_{x_1}(x_1)f_{x_2}(x_2)\cdots f_{x_m}(x_m) \tag{1.3.8}$$

用文字表述以上定义，即有：若 m 个随机变量的联合分布函数 (或联合概率密度函数) 等于各个随机变量的边缘分布函数 (或边缘概率密度函数) 之积，则这 m 个随机变量是联合独立的。为了与线性独立 (即线性无关) 相区别，随机变量之间的独立被称为统计独立。

2. 复随机向量的概率密度函数

一个复随机变量定义为 $x(\xi)=x_{\rm R}(\xi)+{\rm j}\,x_{\rm I}(\xi)$，其中，$x_{\rm R}(\xi)$ 和 $x_{\rm I}(\xi)$ 分别为实值随机变量。

复随机向量可以表示成

$$\boldsymbol{x}(\xi)=\boldsymbol{x}_{\rm R}(\xi)+{\rm j}\,\boldsymbol{x}_{\rm I}(\xi)=\begin{bmatrix}x_{\rm R1}(\xi)\\x_{\rm R2}(\xi)\\\vdots\\x_{{\rm R}m}(\xi)\end{bmatrix}+{\rm j}\begin{bmatrix}x_{\rm I1}(\xi)\\x_{\rm I2}(\xi)\\\vdots\\x_{{\rm I}m}(\xi)\end{bmatrix}\tag{1.3.9}$$

复随机向量的累积分布函数定义为

$$F(\boldsymbol{x})\stackrel{\rm def}{=}P\{\boldsymbol{x}(\xi)\leqslant\boldsymbol{x}\}\stackrel{\rm def}{=}P\{\boldsymbol{x}_{\rm R}(\xi)\leqslant\boldsymbol{x}_{\rm R},\boldsymbol{x}_{\rm I}(\xi)\leqslant\boldsymbol{x}_{\rm R}\}\tag{1.3.10}$$

概率密度函数定义为

$$f(\boldsymbol{x})\stackrel{\rm def}{=}\frac{\partial^{2m}F(\boldsymbol{x})}{\partial x_{\rm R1}\partial x_{\rm I1}\cdots\partial x_{{\rm R}m}\partial x_{{\rm I}m}}\tag{1.3.11}$$

由式 (1.3.10) 和式 (1.3.11) 知，累积分布函数是概率密度函数关于所有实部和虚部的 $2m$ 重积分，即

$$\begin{aligned}F(\boldsymbol{x})&=F_{\boldsymbol{x}}(x_1,x_2,\cdots,x_m)\\&=\int_{-\infty}^{x_{\rm R1}}\int_{-\infty}^{x_{\rm I1}}\cdots\int_{-\infty}^{x_{{\rm R}m}}\int_{-\infty}^{x_{{\rm I}m}}f(v_1,\cdots,v_m){\rm d}v_{\rm R1}{\rm d}v_{\rm I1}\cdots{\rm d}v_{{\rm R}m}{\rm d}v_{{\rm I}m}\\&=\int_{-\infty}^{\boldsymbol{x}}f(\boldsymbol{v}){\rm d}\boldsymbol{v}\end{aligned}\tag{1.3.12}$$

特别地

$$\int_{-\infty}^{\infty}f(\boldsymbol{x}){\rm d}\boldsymbol{x}=1\tag{1.3.13}$$

1.3.2 随机向量的统计描述

分布函数和概率密度函数常常是未知的，因此它们在很多实际问题中的应用并不方便。与之不同，随机向量的一阶和二阶统计量却使用方便。

1. 均值向量

随机向量的最重要统计运算为数学期望。考查 $m\times1$ 随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)=[x_1(\xi),x_2(\xi),\cdots,x_m(\xi)]^{\rm T}$。令随机变量 $x_i(\xi)$ 的均值 ${\rm E}\{x_i(\xi)\}=\mu_i$，则随机向量的数学期望称为均值向量，记作 $\boldsymbol{\mu}_x$，定义为

$$\boldsymbol{\mu}_x={\rm E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\}=\begin{bmatrix}{\rm E}\{x_1(\xi)\}\\{\rm E}\{x_2(\xi)\}\\\vdots\\{\rm E}\{x_m(\xi)\}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mu_1\\\mu_2\\\vdots\\\mu_m\end{bmatrix}\tag{1.3.14}$$

式中，数学期望定义为

$$\mathrm{E}\{x(\xi)\} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} x f(x)\mathrm{d}x \tag{1.3.15}$$

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\} \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{x} f(\boldsymbol{x})\mathrm{d}\boldsymbol{x} \tag{1.3.16}$$

式 (1.3.14) 表明，均值向量的元素是随机向量各个元素的均值。

2. *相关矩阵与协方差矩阵*

均值向量是随机向量的一阶矩，它描述随机向量的元素围绕其均值的散布情况。与均值向量不同，随机向量的二阶矩为矩阵，它描述随机向量分布的散布情况。

随机向量的自相关矩阵定义为

$$\boldsymbol{R}_x \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\xi)\} = \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1m} \\ r_{21} & r_{22} & \cdots & r_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ r_{m1} & r_{m2} & \cdots & r_{mm} \end{bmatrix} \tag{1.3.17}$$

式中，$r_{ii}, i=1,2,\cdots,m$ 表示随机变量 $x_i(\xi)$ 的自相关函数，定义为

$$r_{ii} \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{|x_i(\xi)|^2\}, \quad i=1,2,\cdots,m \tag{1.3.18}$$

而 r_{ij} 表示随机变量 $x_i(\xi)$ 和 $x_j(\xi)$ 之间的互相关函数，定义为

$$r_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{x_i(\xi)x_j^*(\xi)\}, \quad i,j=1,2,\cdots,m,\ i\neq j \tag{1.3.19}$$

显然，自相关矩阵是共轭对称的，即为 Hermitian 矩阵。

随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 的自协方差矩阵定义为

$$\boldsymbol{C}_x \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{[\boldsymbol{x}(\xi)-\boldsymbol{\mu}_x][\boldsymbol{x}(\xi)-\boldsymbol{\mu}_x]^{\mathrm{H}}\} = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1m} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{m1} & c_{m2} & \cdots & c_{mm} \end{bmatrix} \tag{1.3.20}$$

式中，主对角线的元素

$$c_{ii} \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{|x_i(\xi)-\mu_i|^2\}, \quad i=1,2,\cdots,m \tag{1.3.21}$$

表示随机变量 $x_i(\xi)$ 的方差 σ_i^2，即 $c_{ii}=\sigma_i^2$，而非主对角线元素

$$c_{ij} \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{[x_i(\xi)-\mu_i][x_j(\xi)-\mu_j]^*\} = \mathrm{E}\{x_i(\xi)x_j^*(\xi)\} - \mu_i\mu_j^* = c_{ji}^* \tag{1.3.22}$$

表示随机变量 $x_i(\xi)$ 和 $x_j(\xi)$ 之间的协方差。自协方差矩阵也是 Hermitian 矩阵。

自相关矩阵和自协方差矩阵之间存在下列关系：

$$\boldsymbol{C}_x = \boldsymbol{R}_x - \boldsymbol{\mu}_x\boldsymbol{\mu}_x^{\mathrm{H}} \tag{1.3.23}$$

推广自相关矩阵和自协方差矩阵的概念，则有随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 的互相关矩阵

$$\boldsymbol{R}_{xy} \overset{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(\xi)\} = \begin{bmatrix} r_{x_1,y_1} & r_{x_1,y_2} & \cdots & r_{x_1,y_m} \\ r_{x_2,y_1} & r_{x_2,y_2} & \cdots & r_{x_2,y_m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ r_{x_m,y_1} & r_{x_m,y_2} & \cdots & r_{x_m,y_m} \end{bmatrix} \tag{1.3.24}$$

和互协方差矩阵

$$\boldsymbol{C}_{xy} \overset{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{[\boldsymbol{x}(\xi) - \boldsymbol{\mu}_x][\boldsymbol{y}(\xi) - \boldsymbol{\mu}_y]^{\mathrm{H}}\} \tag{1.3.25}$$

$$= \boldsymbol{R}_{xy} \quad \boldsymbol{\mu}_x\boldsymbol{\mu}_y^{\mathrm{H}} \tag{1.3.26}$$

$$= \begin{bmatrix} c_{x_1,y_1} & c_{x_1,y_2} & \cdots & c_{x_1,y_m} \\ c_{x_2,y_1} & c_{x_2,y_2} & \cdots & c_{x_2,y_m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{x_m,y_1} & c_{x_m,y_2} & \cdots & c_{x_m,y_m} \end{bmatrix} \tag{1.3.27}$$

式中，$r_{x_i,y_j} \overset{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{x_i(\xi)y_j^*(\xi)\}$ 是随机变量 $x_i(\xi)$ 和 $y_j(\xi)$ 之间的互相关，$c_{x_i,y_j} \overset{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{[x_i(\xi)-\mu_{x_i}][y_j(\xi) - \mu_{y_j}]^*\}$ 是随机变量 $x_i(\xi)$ 和 $y_j(\xi)$ 之间的互协方差。

一个随机向量的自相关矩阵和自协方差矩阵均为正方的共轭对称矩阵，而两个维数不同的随机向量的互相关矩阵和互协方差矩阵是非正方的矩阵。即使随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 维数相同，互相关矩阵和互协方差矩阵为正方矩阵，但它们也不是共轭对称的。

3. 两个随机向量的统计不相关与正交

当采样点 ξ 取一系列值时，随机变量序列 $\{x_i(\xi)\}$ 构成一随机过程或信号。由于随机信号减去自己的均值后，只剩下随机变化部分，所以协方差函数给出的是两个随机信号 $x_i(\xi)$ 和 $x_j(\xi)$ 之间随机变化部分的相乘。一般说来，两个随机信号的随机变化部分中的共性部分的相乘总是取相同的符号，使得共性部分得到加强，而保留下来。与之不同，两个信号的非共性部分则是随机的，它们的乘积有时取正，有时取负，通过数学期望的平均运算后，趋于相互抵消。这意味着，互协方差函数能够把两个信号之间随机变化的共性部分提取出来，并抑制掉非共性部分。因此，互协方差函数描述了两个信号 $x_i(\xi)$ 和 $x_j(\xi)$ 之间的相关 (联) 程度。即是说，互协方差函数越大，则这两个随机信号的相关程度越强；反之，相关程度越弱。但是，这种使用互协方差的绝对大小度量两个随机向量的相关程度并不方便。

两个随机变量 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 之间的相关系数定义为

$$\rho_{xy} \overset{\text{def}}{=} \frac{c_{xy}}{\sqrt{\mathrm{E}\{|x(\xi)|^2\}\mathrm{E}\{|y(\xi)|^2\}}} = \frac{c_{xy}}{\sigma_x\sigma_y} \tag{1.3.28}$$

式中，c_{xy} 是随机变量 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 之间的互协方差，而 σ_x^2 和 σ_y^2 分别是 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 的方差。对相关系数的定义公式使用 Cauchy-Schwartz 不等式，易知

$$0 \leqslant |\rho_{xy}| \leqslant 1 \tag{1.3.29}$$

相关系数 ρ_{xy} 给出了两个随机变量 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 之间的相似程度的度量：ρ_{xy} 越接近于零，随机变量 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 的相似度越弱；反之，若 ρ_{xy} 越接近于 1，则 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 的相似度越大。特别地，相关系数的两个极端值 0 和 1 有着重要的意义。

由于 $\rho_{xy}=0$ 意味着互协方差 $c_{xy}=0$，这表明随机变量 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 之间不存在任何相关部分。因此，若 $\rho_{xy}=0$，则称随机变量 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 不相关。鉴于这种不相关是在统计意义下定义的，所以常称之为统计不相关，以区别其他形式的不相关 (如线性无关等)。

容易验证，若 $x(\xi)=cy(\xi)$，其中，c 为一复常数，则 $|\rho_{xy}|=1$。满足条件 $x(\xi)=cy(\xi)=|c|e^{j\phi(c)}$ 的随机变量 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 只是相差一个固定的幅值比例因子和一个固定的相位 $\phi(c)$。这样的两个随机变量称为完全相关 (或相干)。

将两个随机变量之间的不相关条件 $c_{xy}=0, i\neq j$ 推广到随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 的任意两个元素之间，则知当 $c_{x_i,y_j}=0$ 对所有 i,j 恒成立时，随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 的任何元素都与随机向量 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 的任何元素不相关。此时，称随机变量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 与 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 不相关。于是，随机向量的统计不相关定义如下。

定义 1.3.2 两个随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 与 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 统计不相关，若它们的互协方差矩阵等于零矩阵，即 $\boldsymbol{C}_{xy}=\boldsymbol{O}$。

两个随机变量 $x(\xi)$ 和 $y(\xi)$ 称为正交，若它们的互相关等于零，即

$$r_{xy}=\mathrm{E}\{x(\xi)y^*(\xi)\}=0 \tag{1.3.30}$$

类似地，两个随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)=[x_1(\xi),x_2(\xi),\cdots,x_m(\xi)]^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{y}(\xi)=[y_1(\xi),y_2(\xi),\cdots,y_n(\xi)]^{\mathrm{T}}$ 称为正交，若 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 的任一元素 $x_i(\xi)$ 与随机向量 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 的任意元素 $y_j(\xi)$ 正交，即 $r_{x_i,y_j}=\mathrm{E}\{x_i(\xi)y_j(\xi)\}=0,\forall\, i,j$。显然，这意味着这两个随机向量的互相关矩阵等于零矩阵，即有 $\boldsymbol{R}_{xy}=\boldsymbol{O}$。

定义 1.3.3 称两个随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 与 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 正交，若它们的互相关矩阵等于零矩阵，即 $\boldsymbol{R}_{xy}=\boldsymbol{O}$。

比较互协方差矩阵和互相关矩阵的定义知，若随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 均具有零均值向量，则 $\boldsymbol{C}_{xy}=\boldsymbol{R}_{xy}$。因此，对于分别具有零均值向量的两个随机向量而言，它们之间的统计不相关与正交是等价的。

4. 随机向量的线性变换

令 $\boldsymbol{A}$ 为一复常数矩阵，则

$$\boldsymbol{y}(\xi)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(\xi) \tag{1.3.31}$$

是复正态随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)\sim CN(\boldsymbol{\mu}_x,\boldsymbol{\Gamma}_x)$ 的线性变换。线性变换 $\boldsymbol{y}(\xi)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(\xi)$ 仍然为正态随机向量，记作 $\boldsymbol{y}(\xi)\sim CN(\boldsymbol{\mu}_y,\boldsymbol{\Gamma}_y)$。容易验证，其均值向量

$$\boldsymbol{\mu}_y=\mathrm{E}\{\boldsymbol{y}(\xi)\}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(\xi)\}=\boldsymbol{A}\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{\mu}_x \tag{1.3.32}$$

自相关矩阵为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_y &= \mathrm{E}\{\boldsymbol{y}(\xi)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(\xi)\} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(\xi)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\xi)\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\} \\ &= \boldsymbol{A}\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\xi)\}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\end{aligned} \tag{1.3.33}$$

自协方差矩阵为

$$\boldsymbol{C}_y = \boldsymbol{A}\boldsymbol{C}_x\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \tag{1.3.34}$$

随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 与线性变换 $\boldsymbol{y}(\xi) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(\xi)$ 的互相关矩阵为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_{xy} &= \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(\xi)\} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\xi)\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\} \\ &= \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\xi)\}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{R}_x\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\end{aligned} \tag{1.3.35}$$

于是

$$\boldsymbol{R}_{yx} = \boldsymbol{R}_{xy}^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{R}_x \tag{1.3.36}$$

式中，利用了自协方差矩阵的共轭对称性 $\boldsymbol{R}_x^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{R}_x$。

类似地，随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 与其线性变换 $\boldsymbol{y}(\xi) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(\xi)$ 之间的互协方差矩阵

$$\boldsymbol{C}_{xy} = \boldsymbol{C}_x\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}, \quad \boldsymbol{C}_{yx} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{C}_x \tag{1.3.37}$$

1.3.3 正态随机向量

若随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi) = [x_1(\xi), x_2(\xi), \cdots, x_m(\xi)]^{\mathrm{T}}$ 的各分量为联合正态分布的随机变量，则称 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 为正态随机向量。实随机向量和复随机向量的概率密度函数表示稍有不同。

一个均值向量为 $\boldsymbol{\mu}_x$ 和协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Gamma}_x$ 的实正态随机向量记作 $\boldsymbol{x} \sim N(\boldsymbol{\mu}_x, \boldsymbol{\Gamma}_x)$，其概率密度函数为 [353],[369, p.35−4]

$$f(\boldsymbol{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{m/2}|\boldsymbol{\Gamma}_x|^{1/2}} \exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_x)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Gamma}_x^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_x)\right] \tag{1.3.38}$$

式中，$|\boldsymbol{\Gamma}_x|$ 表示矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}_x$ 的行列式，指数项 $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_x)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Gamma}_x^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_x)$ 是 x_i 的正定二次型函数，也可以写作

$$(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_x)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Gamma}_x^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_x) = \sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\boldsymbol{\Gamma}_x^{-1}(i,j)(x_i-\mu_i)(x_j-\mu_j) \tag{1.3.39}$$

式中，$\boldsymbol{\Gamma}_x^{-1}(i,j)$ 表示逆矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}_x^{-1}$ 的 (i,j) 元素，$\mu_i = \mathrm{E}\{x_i\}$ 是随机变量 x_i 的均值。

实正态随机向量的特征函数为

$$\boldsymbol{\Phi}_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{\omega}) = \exp\left(\mathrm{j}\,\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\mu}_x - \frac{1}{2}\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Gamma}_x\boldsymbol{\omega}\right) \tag{1.3.40}$$

式中，$\boldsymbol{\omega} = [\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_m]^{\mathrm{T}}$。

令 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_m]^{\mathrm{T}}$，其每个元素服从复正态分布，即 $x_i \sim CN(\mu_i,\sigma_i^2)$，则 $\boldsymbol{x}$ 称为复正态随机向量，记作 $\boldsymbol{x}\sim CN(\boldsymbol{\mu}_x,\boldsymbol{\Gamma}_x)$，其中，$\boldsymbol{\mu}_x=[\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_m]^{\mathrm{T}}$。若 $x_i=u_i+\mathrm{j}v_i$，并且实随机向量 $[u_1,v_1]^{\mathrm{T}},[u_2,v_2]^{\mathrm{T}},\cdots,[u_m,v_m]^{\mathrm{T}}$ 统计独立，则复随机正态向量 $\boldsymbol{x}$ 的概率密度函数为 [369, p.35–5]

$$f(\boldsymbol{x})=\prod_{i=1}^{m}f(x_i)=\left(\pi^m\prod_{i=1}^{m}\sigma_i^2\right)^{-1}\exp\left(-\sum_{i=1}^{m}\frac{1}{\sigma_i^2}|x_i-\mu_i|^2\right) \tag{1.3.41}$$

$$=\frac{1}{\pi^m|\boldsymbol{\Gamma}_x|}\exp\left[-(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_x)^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Gamma}_x^{-1}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{\mu}_x)\right] \tag{1.3.42}$$

式中，$\boldsymbol{\Gamma}_x=\mathrm{diag}(\sigma_1^2,\sigma_2^2,\cdots,\sigma_m^2)$。复正态随机向量的特征函数由下式给出：

$$\Phi_{\boldsymbol{x}}(\boldsymbol{\omega})=\exp\left[\mathrm{j}\,\mathrm{Re}(\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\mu}_x)-\frac{1}{4}\boldsymbol{\omega}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Gamma}_x\boldsymbol{\omega}\right] \tag{1.3.43}$$

正态随机向量具有以下重要性质。

(1) 概率密度函数由均值向量和协方差矩阵完全描述。

(2) 若正态随机向量的各个分量相互统计不相关，则它们也是统计独立的。

(3) 均值向量 $\boldsymbol{\mu}_x$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}_x$ 的正态随机向量 $\boldsymbol{x}$ 的线性变换 $\boldsymbol{y}(\xi)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(\xi)$ 仍然为正态随机向量，其概率密度函数为

$$f(\boldsymbol{y})=\frac{1}{(2\pi)^{m/2}|\boldsymbol{\Gamma}_y|^{1/2}}\exp\left[-\frac{1}{2}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\mu}_y)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Gamma}_y^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\mu}_y)\right]\quad(\text{实正态随机向量}) \tag{1.3.44}$$

$$f(\boldsymbol{y})=\frac{1}{\pi^m|\boldsymbol{\Gamma}_y|}\exp\left[-(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\mu}_y)^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Gamma}_y^{-1}(\boldsymbol{y}-\boldsymbol{\mu}_y)\right]\quad(\text{复正态随机向量}) \tag{1.3.45}$$

下面以信号处理中的加性噪声作为典型例子，说明实正态随机向量与复正态随机向量的统计表示的不同。在阵列处理、无线通信和多信道信号处理中，常常使用多个传感器或者阵元接收多路信号。在大多数情况下，可以假定每个传感器上的加性噪声都是高斯白噪声，并且这些传感器上的加性高斯白噪声是彼此统计不相关的。

例 1.3.1 令 $\boldsymbol{x}(t)=[x_1(t),x_2(t),\cdots,x_m(t)]^{\mathrm{T}}$ 为一实值正态随机向量，其中，$x_1(t)$, $x_2(t),\cdots,x_m(t)$ 表示 m 个传感器上的加性高斯白噪声，变量 t 代表时间。若这些加性高斯白噪声彼此不相关，并且均具有零均值向量和相同的方差 σ^2，则任何两个加性高斯白噪声之间的互协方差与互相关相同，且满足以下关系：

$$c_{x_i,x_j}=r_{x_i,x_j}=\begin{cases}\sigma^2, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases} \tag{1.3.46}$$

这表明，具有零均值向量的实高斯白噪声向量 $\boldsymbol{x}(t)$ 的自协方差矩阵和自相关矩阵相等，并且

$$\boldsymbol{C}_x=\boldsymbol{R}_x=\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(t)\}=\begin{bmatrix}r_{x_1,x_1} & r_{x_1,x_2} & \cdots & r_{x_1,x_m}\\ r_{x_2,x_1} & r_{x_2,x_2} & \cdots & r_{x_2,x_m}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ r_{x_m,x_1} & r_{x_m,x_2} & \cdots & r_{x_m,x_m}\end{bmatrix} \tag{1.3.47}$$

将式 (1.3.46) 代入上式，立即得到实高斯白噪声向量的统计表示为

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\} = \mathbf{0} \tag{1.3.48}$$

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(t)\} = \sigma^2 \boldsymbol{I} \tag{1.3.49}$$

例 1.3.2 令 $\boldsymbol{x}(t) = [x_1(t), x_2(t), \cdots, x_m(t)]^{\mathrm{T}}$ 表示复正态随机向量，其中，$x_1(t), x_2(t), \cdots, x_m(t)$ 表示 m 个传感器上的加性复高斯白噪声，它们彼此不相关，并且都具有零均值向量和相同的方差 σ^2。令 $x_k(t) = x_{\mathrm{R}k}(t) + \mathrm{j}\, x_{\mathrm{I}k}(t)$，其中，$x_{\mathrm{R}k}(t)$ 和 $x_{\mathrm{I}k}(t)$ 是两个实随机过程。注意，一个复高斯白噪声过程意味着其实部 $x_{\mathrm{R}k}(t)$ 和虚部 $x_{\mathrm{I}k}(t)$ 是两个相互独立的高斯白噪声过程，它们具有相同的方差。因此，$x_k(t)$ 为零均值和方差 σ^2 的高斯白噪声过程意味着

$$\begin{aligned}
&\mathrm{E}\{x_{\mathrm{R}k}(t)\} = 0\\
&\mathrm{E}\{x_{\mathrm{I}k}(t)\} = 0\\
&\mathrm{E}\{x_{\mathrm{R}k}^2(t)\} = \mathrm{E}\{x_{\mathrm{I}k}^2(t)\} = \frac{1}{2}\sigma^2\\
&\mathrm{E}\{x_{\mathrm{R}k}(t)x_{\mathrm{I}k}(t)\} = 0\\
&\mathrm{E}\{x_k(t)x_k^*(t)\} = \mathrm{E}\{x_{\mathrm{R}k}^2(t)\} + \mathrm{E}\{x_{\mathrm{I}k}^2(t)\} = \sigma^2
\end{aligned}$$

由上述条件知

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\{x_k^2(t)\} &= \mathrm{E}\{[x_{\mathrm{R}k}(t) + \mathrm{j}\, x_{\mathrm{I}k}(t)]^2\}\\
&= \mathrm{E}\{x_{\mathrm{R}k}^2(t)\} - \mathrm{E}\{x_{\mathrm{I}k}^2(t)\} + \mathrm{j}\,\mathrm{E}\{x_{\mathrm{R}k}(t)x_{\mathrm{I}k}(t)\}\\
&= \frac{1}{2}\sigma^2 - \frac{1}{2}\sigma^2 + 0 = 0
\end{aligned}$$

由于 $x_1(t), \cdots, x_m(t)$ 是 m 个彼此不相关的高斯白噪声过程，故

$$\mathrm{E}\{x_i(t)x_j(t)\} = 0, \quad \mathrm{E}\{x_i(t)x_j^*(t)\} = 0, \quad i \neq j$$

综合以上条件，即可得到复高斯白噪声向量 $\boldsymbol{x}(t)$ 的统计表示为

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\} = \mathbf{0} \tag{1.3.50}$$

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\} = \sigma^2 \boldsymbol{I} \tag{1.3.51}$$

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(t)\} = \boldsymbol{O} \tag{1.3.52}$$

1.4 内积与范数

虽然 1.2 节讨论内积空间时，曾经介绍过向量的内积与范数，但只是从引出内积空间的定义这一立场出发，对向量的内积与范数作了比较简单的介绍。特别地，向量的范数定义有多种，1.2 节只是简单地提及了典范内积一种，而且对它未作深入讨论。本节将对向量的内积与范数展开比较全面与深入的讨论，然后推广到矩阵的内积与范数。

1.4.1 向量的内积与范数

根据元素取值方式的不同，向量分为常数向量、函数向量和随机向量。如前所述，常数向量是元素为常数的向量；函数向量是元素取某个变量的函数值的向量；而随机向量则是元素为随机变量的向量。虽然常数向量、函数向量和随机向量的内积定义公式有所不同，但是无论向量取何种形式，向量的内积和范数都必须服从一定的公理。由于实向量是复向量的特例，下面以复向量作为讨论对象，并用 R 和 C 分别代表实数域和复数域。

定义 1.4.1 令 V 是复向量空间。函数 $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle : V \times V \mapsto C$ 称为向量 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的内积，若对所有 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \in V$，以下内积公理满足：

(1) $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle \geqslant 0$ (非负性)

(1a) $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle = 0$，当且仅当 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ (正性)

(2) $\langle \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \rangle = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{z} \rangle + \langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{z} \rangle$ (可加性)

(3) $\langle c\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = c^* \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle$，对所有复常数 c 成立 (齐次性)

(4) $\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{x} \rangle^*$ (Hermitian 性)

式中，$*$ 表示复数共轭。

定义 1.4.2 令 V 是复向量空间。函数 $\|\boldsymbol{x}\| : V \mapsto R$ 称为向量 $\boldsymbol{x}$ 的范数，若对所有 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in V$，下面的范数公理成立：

(1) $\|\boldsymbol{x}\| \geqslant 0$ (非负性)

(1a) $\|\boldsymbol{x}\| = 0$，当且仅当 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ (正性)

(2) $\|c\boldsymbol{x}\| = |c| \, \|\boldsymbol{x}\|$，对所有复常数 c 成立 (齐次性)

(3) $\|\boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}\| + \|\boldsymbol{y}\|$ (三角不等式)

上述公理是平面上的 Euclidean 长度的熟知性质。满足公理 (1)，(2)，(3)，但不一定满足公理 (1a) 的函数称为向量的半范数。

下面分别介绍常数向量、函数向量和随机向量的内积与范数。

1. *常数向量的内积与范数*

根据定义 1.4.1，两个 $m \times 1$ 维常数向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_m]^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{y} = [y_1, y_2, \cdots, y_m]^{\mathrm{T}}$ 的内积 (或叫点积) 定义为

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{m} x_i^* y_i \tag{1.4.1}$$

定义 1.4.3 两个向量之间的夹角定义为

$$\cos\theta \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle}{\sqrt{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} \rangle}\sqrt{\langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{y} \rangle}} = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{y}}{\|\boldsymbol{x}\| \|\boldsymbol{y}\|} \tag{1.4.2}$$

显然，若 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{y} = 0$，则 $\theta = \pi/2$。此时，称常数向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 正交。因此，两个常数向量正交的数学定义如下。

定义 1.4.4 两个常数向量称为正交，若它们的内积等于零，即 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{y} = 0$，并记作 $\boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{y}$。

根据定义知，零向量 **0** 与同一空间的任何向量都正交。

例 1.4.1　序列 $\{\exp(\mathrm{j}2\pi fm)\}$ 是一个以单位时间间隔被采样的频率为 f 的正弦波。复正弦波向量 $\boldsymbol{e}_m(f)$ 定义为 $(m+1)\times 1$ 向量，即

$$\boldsymbol{e}_m(f)=\left[1,\mathrm{e}^{\mathrm{j}(\frac{2\pi}{m+1})f},\cdots,\mathrm{e}^{\mathrm{j}(\frac{2\pi}{m+1})mf}\right]^{\mathrm{T}}$$

这样一来，N 个数据样本 $x(n),n=0,1,\cdots,N-1$ 的离散 Fourier 变换 (DFT) 就可以用向量的内积表示为

$$X(f)=\sum_{n=0}^{N-1}x(n)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}(\frac{2\pi}{N})nf}=\boldsymbol{e}_{N-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

其中，$\boldsymbol{x}=[x(0),x(1),\cdots,x(N-1)]^{\mathrm{T}}$ 常称为数据向量。

下面是几种常用的向量范数。

(1) l_1 范数

$$\|\boldsymbol{x}\|_1\overset{\text{def}}{=}\left|\sum_{i=1}^{m}x_i\right|=|x_1|+|x_2|+\cdots+|x_m| \tag{1.4.3}$$

上述范数有时也叫和范数或 1 范数。

(2) l_2 范数

$$\|\boldsymbol{x}\|_2=(|x_1|^2+|x_2|^2+\cdots+|x_n|^2)^{1/2} \tag{1.4.4}$$

这一范数常称 Euclidean 范数，有时也称 Frobenius 范数。

(3) l_∞ 范数

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty=\max(|x_1|,|x_2|,\cdots,|x_n|) \tag{1.4.5}$$

也称无穷范数或极大范数。

(4) l_p 范数

$$\|\boldsymbol{x}\|_p=\left(\sum_{i=1}^{m}|x_i|^p\right)^{1/p},\qquad p\geqslant 1 \tag{1.4.6}$$

l_p 范数也叫 Hölder 范数 [270]。

当 $p=2$ 时，l_p 范数与 Euclidean 范数完全等价。另外，无穷范数是 l_p 范数的极限形式，即有

$$\|\boldsymbol{x}\|_\infty=\lim_{p\to\infty}\left(\sum_{i=1}^{m}|x_i|^p\right)^{1/p} \tag{1.4.7}$$

范数 $\|\boldsymbol{x}\|$ 称为酉不变的，若 $\|\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}\|=\|\boldsymbol{x}\|$ 对所有向量 $\boldsymbol{x}\in C^m$ 和所有酉矩阵 $\boldsymbol{U}\in C^{m\times m}$ 恒成立。

命题 1.4.1 [224]　Euclidean 范数 $\|\cdot\|_2$ 是酉不变的。

假定向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 有共同的起点 (即原点 O)，它们的端点分别为 x 和 y，则 $\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2$ 度量两个向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 两端点 x,y 之间的标准 Euclidean 距离。特别地，非负的标量 $\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle^{1/2}$ 称为向量 $\boldsymbol{x}$ 的 Euclidean 长度。Euclidean 长度为 1 的向量叫做归一化 (或标准化) 向量。对于任何不为零的向量 $\boldsymbol{x}\in C^m$，向量 $\boldsymbol{x}/\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle^{1/2}$ 都是归一化的，并且它与 $\boldsymbol{x}$ 同方向。

Euclidean 范数是应用最为广泛的向量范数定义。在本书后面的讨论中，如无特别声明，向量范数均指 Euclidean 范数。

常数向量 $\boldsymbol{w}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的外积 (又叫叉积) 记作 $\boldsymbol{w}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}$，定义为

$$\boldsymbol{w}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}=\begin{bmatrix} w_1v_1^* & w_1v_2^* & \cdots & w_1v_m^* \\ w_2v_1^* & w_2v_2^* & \cdots & w_2v_m^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ w_mv_1^* & w_mv_2^* & \cdots & w_mv_m^* \end{bmatrix} \tag{1.4.8}$$

2. 函数向量的内积与范数

若 $\boldsymbol{x}(t)$ 和 $\boldsymbol{y}(t)$ 分别是变量 t 的函数向量，则它们的内积定义为

$$\langle \boldsymbol{x}(t), \boldsymbol{y}(t)\rangle \stackrel{\mathrm{def}}{=} \int_a^b \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\boldsymbol{y}(t)\mathrm{d}t \tag{1.4.9}$$

其中，变量 t 在 $[a,b]$ 取值，且 $a<b$。变量 t 可以是时间变量、频率变量或者空间变量。

两个函数向量的夹角定义为

$$\cos\theta \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle}{\sqrt{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}\rangle}\sqrt{\langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{y}\rangle}} = \frac{\displaystyle\int_a^b \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\boldsymbol{y}(t)\mathrm{d}t}{\|\boldsymbol{x}(t)\|\|\boldsymbol{y}(t)\|} \tag{1.4.10}$$

式中，$\|\boldsymbol{x}(t)\|$ 是函数向量 $\boldsymbol{x}(t)$ 的范数，定义为

$$\|\boldsymbol{x}(t)\| \stackrel{\mathrm{def}}{=} \left(\int_a^b \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\boldsymbol{x}(t)\mathrm{d}t\right)^{1/2} \tag{1.4.11}$$

显然，若两个函数向量的内积等于零，即

$$\int_{-\infty}^{\infty} \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\boldsymbol{y}(t)\mathrm{d}t = 0$$

则 $\theta=\pi/2$。此时，称两个函数向量正交，并记作 $\boldsymbol{x}(t)\perp\boldsymbol{y}(t)$。

3. 随机向量的内积与范数

若 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 分别是样本变量 ξ 的随机向量，则它们的内积定义为

$$\langle \boldsymbol{x}(\xi), \boldsymbol{y}(\xi)\rangle \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\xi)\boldsymbol{y}(\xi)\} \tag{1.4.12}$$

其中，样本变量 ξ 可以是时间 t、圆频率 f、角频率 ω 和空间变量 s 等。

随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 的范数定义为

$$\|\boldsymbol{x}(\xi)\|^2 \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\xi)\boldsymbol{x}(\xi)\} \tag{1.4.13}$$

与常数向量和函数向量的情况不同，$m\times 1$ 随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $n\times 1$ 随机向量 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 称为正交，若 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 的任意元素与 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 的任意元素正交。这意味着，两个向量的互相关矩阵为零矩阵 $\boldsymbol{O}_{m\times n}$，即

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(\xi)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(\xi)\} = \boldsymbol{O}_{m\times n} \tag{1.4.14}$$

并记作 $\boldsymbol{x}(\xi) \perp \boldsymbol{y}(\xi)$。

下面的命题表明，任意两个正交向量之和的范数平方等于各个向量范数平方之和。

命题 1.4.2 若 $\boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{y}$，则 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 = \|\boldsymbol{x}\|^2 + \|\boldsymbol{y}\|^2$。

证明 由范数公理知

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 = \langle \boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\rangle = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle + \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle + \langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{x}\rangle + \langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{y}\rangle \tag{1.4.15}$$

由于 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 正交，所以 $\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\} = 0$。又由内积公理知 $\langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{x}\rangle = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle = 0$。将这一结果代入式 (1.4.15) 立即得

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle + \langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{y}\rangle = \|\boldsymbol{x}\|^2 + \|\boldsymbol{y}\|^2 \tag{1.4.16}$$

本命题得证。 ■

这一命题也称 Pythagorean 定理。

命题 1.4.3 $|\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle| \leqslant \|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$，等号成立当且仅当 $\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{y}$ 或 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 或 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$。

证明 由内积的非负性知 $\langle \boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}\rangle \geqslant 0$，其中，$\lambda \neq 0$ 为一标量。注意到

$$\langle \boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}\rangle = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle - \lambda\langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{x}\rangle - \lambda\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle + \lambda^2\langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{y}\rangle$$

选择 $\lambda = \dfrac{\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle}{\|\boldsymbol{y}\|^2}$，则上式变为

$$\langle \boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}-\lambda\boldsymbol{y}\rangle = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle - |\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle|^2/\|\boldsymbol{y}\|^2 = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle - |\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle|^2/\langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{y}\rangle \geqslant 0$$

由此得 $|\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle| \leqslant \|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$。显然，当 $\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{y}$ 或 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 或 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0}$ 时，不等式取等号。 ■

不等式 $|\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle| \leqslant \|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$ 称为 Cauchy-Schwartz 不等式。

下面的命题称为平行四边形法则。

命题 1.4.4 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 + \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2 = 2\|\boldsymbol{x}\|^2 + 2\|\boldsymbol{y}\|^2$。

证明 具体计算范数，得

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 = \langle \boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\rangle = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle + 2\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle + \langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{y}\rangle$$

$$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2 = \langle \boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\rangle = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle - 2\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle + \langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{y}\rangle$$

两式相加，即有

$$\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2 + \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2 = 2\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{x}\rangle + 2\langle \boldsymbol{y},\boldsymbol{y}\rangle = 2(\|\boldsymbol{x}\|^2 + \|\boldsymbol{y}\|^2)$$

这即是希望证明的结果。 ■

定义 1.4.5 若 $n \to \infty$ 时，有 $\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}\| \to 0$，则称 $\boldsymbol{x}_n$ 收敛为 $\boldsymbol{x}$。

下面的命题表明，范数具有连续性。

命题 1.4.5 若 $\boldsymbol{x}_n \to \boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}_n \to \boldsymbol{y}$，则 $\langle \boldsymbol{x}_n,\boldsymbol{y}_n\rangle \to \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$。

证明 若 $\boldsymbol{x}_n \to \boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}_n \to \boldsymbol{y}$，则 $\boldsymbol{x}_n$ 和 $\boldsymbol{y}_n$ 必然是有界的向量，即 $\|\boldsymbol{x}_n\| \leqslant m_1$ 和 $\|\boldsymbol{y}_n\| \leqslant m_2$，且 $\|\boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{x}\| \to 0$, $\|\boldsymbol{y}_n - \boldsymbol{y}\| \to 0$ 当 $n \to \infty$。考查

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle &= \langle \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_n+\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_n+\boldsymbol{y}_n\rangle \\ &= \langle \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_n\rangle + \langle \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{y}_n\rangle + \langle \boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_n\rangle + \langle \boldsymbol{x}_n,\boldsymbol{y}_n\rangle \qquad (1)\end{aligned}$$

然而，由命题 1.4.3 及题意知，上式右边前三项分别为

$$\left.\begin{aligned}|\langle \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_n,\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_n\rangle|^2 &\leqslant \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_n\|\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_n\| \to 0, \quad n\to\infty\\ \langle \boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_n,\boldsymbol{y}_n\rangle &\leqslant \|\boldsymbol{y}_n\|\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_n\| \leqslant m_2\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}_n\| \to 0, \quad n\to\infty\\ \langle \boldsymbol{x}_n,\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_n\rangle &\leqslant \|\boldsymbol{x}_n\|\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_n\| \leqslant m_1\|\boldsymbol{y}-\boldsymbol{y}_n\| \to 0, \quad n\to\infty\end{aligned}\right\}$$

将以上公式代入式 (1) 即知：当 $n\to\infty$ 时，$\langle \boldsymbol{x}_n,\boldsymbol{y}_n\rangle \to \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$。 ■

下面从数学定义、几何解释和物理意义三个方面，对常数向量、函数向量和随机向量的正交作一归纳与总结：

(1) 数学定义：两个向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 正交，若它们的内积等于零，即 $\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle = 0$ (对常数向量和函数向量)，或者它们的外积的数学期望等于零矩阵，即 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\} = \boldsymbol{O}$ (对随机向量)。

(2) 几何解释：若两个向量正交，则这两个向量之间的夹角为 90°，并且一个向量到另一个向量的投影等于零。

(3) 物理意义：当两个向量正交时，一个向量中将不含另一个向量的任何成分，即这两个向量之间不存在任何相互作用或干扰。

记住这些要点，将有助于在实际中灵活使用向量的正交。

1.4.2 向量的相似度

考虑 M 个类型的模式，它们分别记作 $\omega_1,\omega_2,\cdots,\omega_M$，编号随意。假定通过已知类型属性的观测样本，业已抽取出 M 个样本模式向量 $\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\cdots,\boldsymbol{s}_M$。给定一任意的未知模式向量 $\boldsymbol{x}$，希望判断它归属于哪一类模式。这个问题称为模式分类，它是模式识别的基本问题之一。模式分类的基本思想是将未知模式向量 $\boldsymbol{x}$ 同 M 个样本模式向量进行比对，看 $\boldsymbol{x}$ 与哪一个样本模式向量最相似，并据此作出模式分类的判断。

假定 $(\boldsymbol{x},\boldsymbol{s}_1),(\boldsymbol{x},\boldsymbol{s}_2),\cdots,(\boldsymbol{x},\boldsymbol{s}_M)$ 分别作为未知模式向量 $\boldsymbol{x}$ 和已知样本模式向量 $\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\cdots,\boldsymbol{s}_M$ 之间的相似关系的符号。以 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2$ 的相似关系为例，若

$$(\boldsymbol{x},\boldsymbol{s}_1) \leqslant (\boldsymbol{x},\boldsymbol{s}_2) \tag{1.4.17}$$

则称未知模式向量 $\boldsymbol{x}$ 与样本模式向量 $\boldsymbol{s}_1$ 更相似。为了建立式 (1.4.17) 的相似关系，需要定义相似度 (similarity) 或相异度 (dissimilarity)。

最简单和最直观的相似度是两个向量之间的 Euclidean 距离。未知模式向量 $\boldsymbol{x}$ 与第 i 个原象模式向量 $\boldsymbol{s}_i$ 之间的 Euclidean 距离记作 $D(\boldsymbol{s}_i,\boldsymbol{x})$，定义为

$$D(\boldsymbol{s}_i,\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{s}_i\|_2 = \sqrt{(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{s}_i)^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{s}_i)} \tag{1.4.18}$$

称 $\boldsymbol{s}_i \in \{\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\cdots,\boldsymbol{s}_M\}$ 是到 $\boldsymbol{x}$ 的近邻 (即最近的邻居)，若

$$D(\boldsymbol{s}_i,\boldsymbol{x}) = \min_k D(\boldsymbol{s}_k,\boldsymbol{x}), \quad k=1,2,\cdots,M \tag{1.4.19}$$

作为一种广泛使用的分类法，近邻分类 (nearest neighbor classification) 法将未知类型的模式向量 $\boldsymbol{x}$ 归为它的近邻所属的模式类型。

除了 Enclidean 距离外，另外一个有用的距离函数是 Mahalanobis 距离。令

$$m = \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} s_i \tag{1.4.20}$$

代表 N 个样本模式向量的均值向量，并使用

$$C = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}(s_i - m)(s_i - m)^{\mathrm{T}} \tag{1.4.21}$$

表示 N 个样本模式向量的协方差矩阵。

从未知模式向量 x 到均值向量 m 之间的 Mahalanobis 距离定义为

$$D(m, x) = (x - m)^{\mathrm{T}} C (x - m) \tag{1.4.22}$$

类似地，从第 i 个样本模式向量 s_i 到均值向量 m 的 Mahalanobis 距离定义为

$$D(m, s_i) = (s_i - m)^{\mathrm{T}} C (s_i - m) \tag{1.4.23}$$

根据近邻分类法，将未知模式向量 x 归为满足

$$D(s_i, x) = \min_k |D(s_k, x) - D(m, x)|, \quad k = 1, 2, \cdots, N \tag{1.4.24}$$

的近邻 s_i 所属的模式类型。

两个向量之间的相似度的测度不一定局限于距离函数。两个向量的夹角的余弦函数

$$S(s_i, x) = \cos(\theta_i) = \frac{x^{\mathrm{T}} s_i}{\|x\|_2 \|s_i\|_2} \tag{1.4.25}$$

也是相似度的一种有效测度。若 $\cos(\theta_i) < \cos(\theta_j), \forall j \neq i$ 成立，则认为未知模式向量 x 与样本模式向量 s_i 最相似。式 (1.4.25) 的变型

$$S(s_i, x) = \frac{x^{\mathrm{T}} s_i}{x^{\mathrm{T}} x + s_i^{\mathrm{T}} s_i + x^{\mathrm{T}} s_i} \tag{1.4.26}$$

称为 Tanimoto 测度 [447]，它广泛应用于信息恢复、疾病分类、动物和植物分类等。

待分类的信号称为目标信号，分类通常是根据某种物理或几何概念进行的。令 X 为目标信号，A_i 代表第 i 类目标的分类概念。于是，可以有类似于式 (1.4.17) 的关系：

$$(X, A_i) \leqslant (X, A_j), \quad \forall i, j \tag{1.4.27}$$

这类有效关系一般用目标 – 概念距离 (object-concept distance) $D(X, A_i)$ 描述 [420]。因此，若目标 – 概念距离 $D(X, A_i)$ 最小，则将 X 归为第 i 类目标 C_i。

以上介绍了五种相似度：Euclidean 距离、Mahalanobis 距离、夹角余弦、Tanimoto 测度以及目标 – 概念距离。

1.4.3 正交向量在移动通信中的应用

在移动通信中，总是有很多用户希望能够同享一个发射媒介，进行无线通信。这种通信方式称为多址通信。多址通信的理论基础是 [374]：若用户之间的信号可以做到正交，这些用户就可以同享一个发射媒介。下面是几种主要的多址通信技术：

1. 时分多址 (time-division multiple access，TDMA)

用户共享整个频率信道，但每个用户被基站分配以不同的时区，并且相邻用户之间插有保护时隙，以使得他们的信号在时域没有任何重叠，从而实现用户信号之间 (在时域) 的正交，即有 $\langle s_i(t), s_j(t)\rangle = 0, \forall i \neq j$，参见图 1.4.1。由于在用户 i 工作的时区，只有用户 i 的离散信号向量 $\boldsymbol{s}_i = [s_i(1), s_i(2), \cdots, s_i(N)]^{\mathrm{T}}$ 不为零，其他用户的离散信号均为零向量，所以时分多址实际上依靠向量正交 $\langle \boldsymbol{s}_i, \boldsymbol{s}_j\rangle = 0$ 实现多址通信。

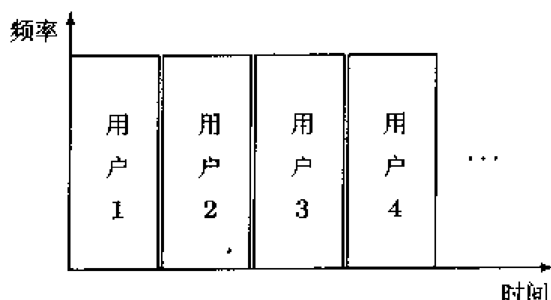


图 1.4.1 时分多址原理图

2. 频分多址 (frequency-division multiple access, FDMA)

所有用户可以同时进行通信，但每个用户被基站分配以不同的通信频道。即是说，所有用户信号在频域没有重叠，并且相邻用户的频道之间插有保护频隙，从而实现用户信号之间 (在频域) 的正交，即有 $\langle S_i(f), S_j(f)\rangle = 0, \forall i \neq j$，如图 1.4.2 所示。

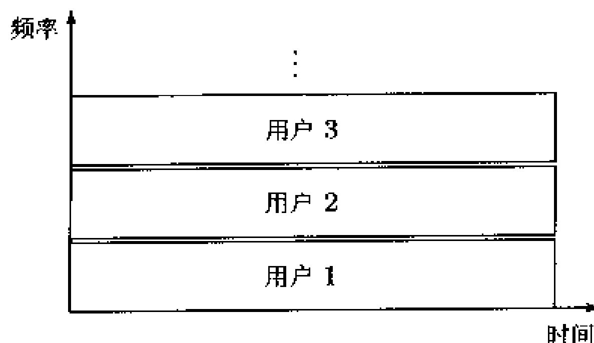


图 1.4.2 频分多址原理图

在用户 i 工作的频段，经过频率域的采样，只有用户 i 的频域信号为非零向量形式 $\hat{\boldsymbol{s}}_i = [S_i(1), S_i(2), \cdots, S_i(M)]^{\mathrm{T}}$，其他用户的频域信号为零向量。因此，频分多址实际上依靠向量正交 $\langle \hat{\boldsymbol{s}}_i, \hat{\boldsymbol{s}}_j\rangle = 0$ 实现多址通信。

3. 跳频 – 码分多址 (hopping-frequency code-division multiple access, HF-CDMA)

在同一个时区，每个用户被分配不同的频道，并且相邻频道之间插有保护频隙。不同的时区，分配给用户的频道不同，即同一个用户的频道是跳跃变化的。图 1.4.3 以 5 个用户为例，画出了 4 次跳频的分配，其中，省画了相邻频道之间的保护频隙。

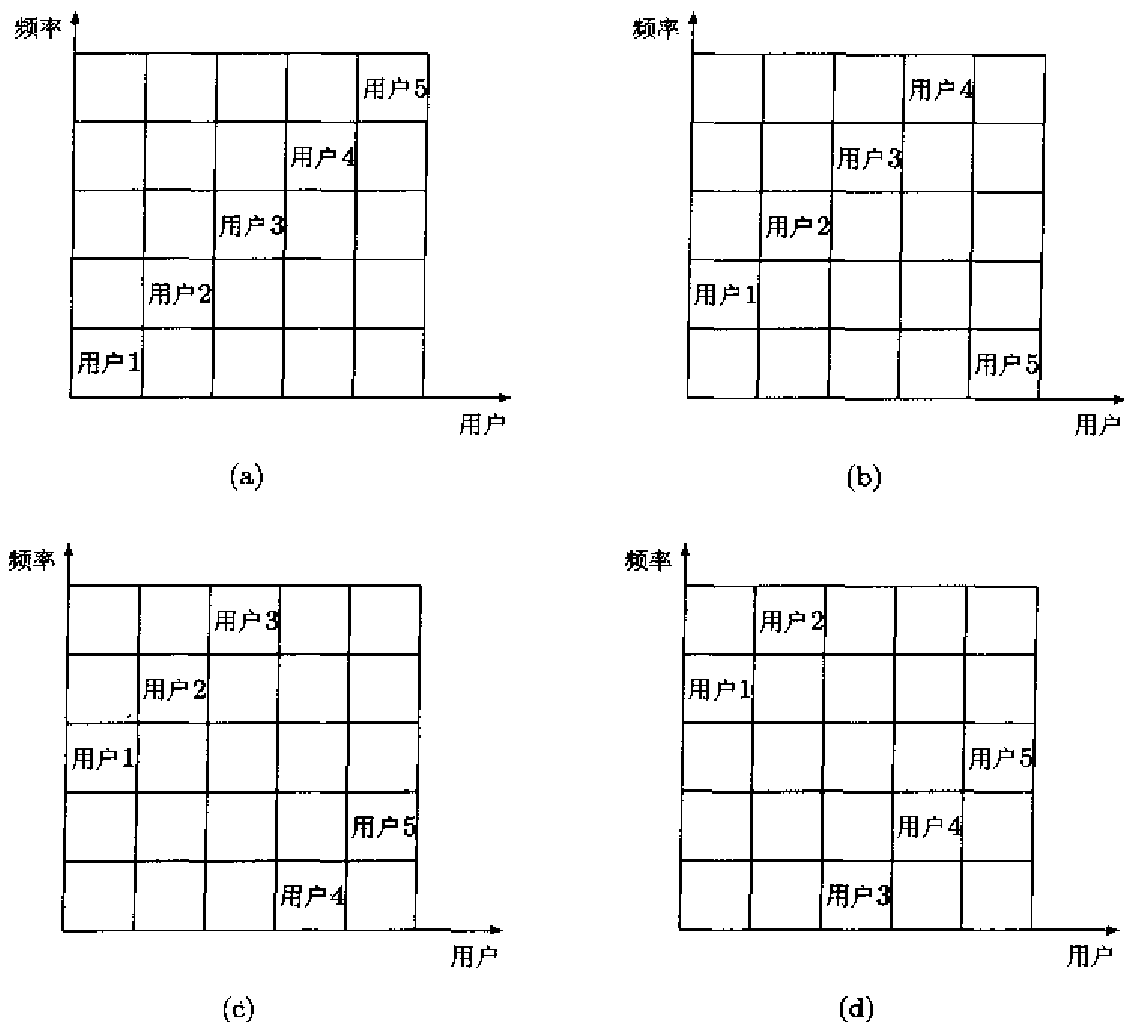


图 1.4.3 跳频 – 码分多址原理图

(a) 时区 1；(b) 时区 2；(c) 时区 3；(d) 时区 4

显然，只要能够保证在同一时区，各个用户的频道不重叠，其他各种形式的跳频都是可行的。

4. 直接序列 – 码分多址 (direct sequence code-division multiple access, DS-CDMA)

所有用户不仅可以同时进行通信，并且共享整个通信频道，但每个用户被基站分配以不同的扩频码向量 $s_i = [s_i(1), s_i(2), \cdots, s_i(L)]^{\mathrm{T}}$，其中，$L$ 代表扩频增益。虽然这些扩频码在时间域或者频率域都是重叠的，但由于各个用户的扩频码为伪随机码，相互正交，故码分多址依靠扩频码向量间的正交实现多址通信。

1.4.4 向量范数用作 Lyapunov 函数

Lyapunov 直接法是分析和构造线性和非线性控制系统最成功的工具之一。

定理 1.4.1 (Lyapunov 稳定性定理) 若对连续系统 $\dot{x} = f(x)$ 或离散系统 $x_{k+1} = f(x_k)$ 存在一个函数 $V(x)$ 具有平衡点 $x = 0$，且 V 在整个 R^n 内满足条件：

(1) V 是正定和径向无界函数，

(2) 对 $x \neq 0$

$$DV = \lim_{\Delta t \to 0} \sup \frac{V(x(t+\Delta t)) - V(x(t))}{\Delta t} < 0 \quad (\text{连续系统})$$

或

$$\Delta V = V(x_{k+1}) - V(x_k) < 0 \quad (\text{离散系统})$$

则平衡点 $x = 0$ 是全局渐近稳定的。

在向量 $\boldsymbol{x}$ 的 n 维空间内，考虑用向量范数

$$V(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{W}\boldsymbol{x}\|$$

作为定理 1.4.1 中的函数 $V(\boldsymbol{x})$，其中，$\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \cdots, \boldsymbol{w}_n]$ 是 $m \times n$ 矩阵，且 $m \geqslant n$ 和 $\text{rank}(\boldsymbol{W}) = n$。

l_p 范数 (Hölder 范数) 构成了一类特殊的向量范数，其中，Euclidean 范数

$$V(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{W}\boldsymbol{x}\|_2 = \left(\sum_i |\boldsymbol{w}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}|^2\right)^{1/2} \tag{1.4.28}$$

和无穷范数

$$V(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{W}\boldsymbol{x}\|_\infty = \lim_{p\to\infty}\left(\sum_i |\boldsymbol{w}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}|^p\right)^{1/p} = \max_i\{\boldsymbol{w}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\} \tag{1.4.29}$$

是 Lyapunov 函数的两个重要例子。

定理 1.4.2 [253] 函数 $V(\boldsymbol{x}) = \|\boldsymbol{W}\boldsymbol{x}\|$ (其中，$\boldsymbol{W}$ 是 $m \times n$ 矩阵，且 $\text{rank}\,\boldsymbol{W} = n$) 是系统 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的 Lyapunov 函数，当且仅当矩阵 $\boldsymbol{W}$ 是矩阵方程

$$\boldsymbol{W}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{Q}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{O} \tag{1.4.30}$$

的解，假定矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 满足条件

$$\mu(\boldsymbol{Q}) < 0 \tag{1.4.31}$$

其中

$$\mu(\boldsymbol{Q}) = \lim_{\Delta t \to 0+} \frac{\|\boldsymbol{I} + \Delta t\boldsymbol{Q}\| - 1}{\Delta t} \tag{1.4.32}$$

$\mu(\boldsymbol{Q})$ 有时称为矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的对数矩阵范数 [126]。注意，对数矩阵范数可以是负数，这一点实际上与矩阵范数非负的性质相违背。

如果式 (1.4.28) 的函数是 Lyapunov 函数，那么它的平方

$$V^2(x) = \|\boldsymbol{W}\boldsymbol{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n}(\boldsymbol{w}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})^2 = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{x} \tag{1.4.33}$$

也是 Lyapunov 函数。式 (1.4.33) 的函数为二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}$，其中

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W} \tag{1.4.34}$$

由文献 [198] 知，这样的二次型函数是系统 $\dot{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的 Lyapunov 函数，当且仅当

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} + \boldsymbol{R}\boldsymbol{A} = -\tilde{\boldsymbol{Q}} \tag{1.4.35}$$

的解 $\tilde{\boldsymbol{Q}}$ 是一个正定对称矩阵。

另一方面，定理 1.4.2 表明，式 (1.4.28) 定义的函数是 Lyapunov 函数，从而式 (1.4.33) 的函数也是 Lyapunov 函数，当且仅当矩阵方程式 (1.4.30) 产生一个满足条件式 (1.4.31) 的矩阵 $\boldsymbol{Q}$。这就证明了，具有条件 $\tilde{\boldsymbol{Q}} > 0$ 的 Lyapunov 方程和具有条件式 (1.4.31) 的矩阵方程式 (1.4.30) 二者等价。更严格地，可以用下面的定理来叙述二者的等价性。

定理 1.4.3[253]　下面两个集合等价：

$$L_1 = \left\{\boldsymbol{R} \in R^{n\times n} | \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R} + \boldsymbol{R}\boldsymbol{A} = -\tilde{\boldsymbol{Q}},\ \text{其中，}\ \tilde{\boldsymbol{Q}}, \boldsymbol{R} > 0,\ \ \tilde{\boldsymbol{Q}}\ \text{对称}\right\} \tag{1.4.36}$$

$$L_2 = \left\{\boldsymbol{R} \in R^{n\times n} | \boldsymbol{R} = \boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}, \boldsymbol{W}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{Q}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{O},\ \text{其中，}\ \mu_2(\boldsymbol{Q}) < 0, \mathrm{rank}(\boldsymbol{W}) = n\right\} \tag{1.4.37}$$

将向量的范数与内积加以推广，即可引出矩阵的范数与内积。

1.4.5　矩阵的范数与内积

作为一种算子，实矩阵 $\boldsymbol{A} \in R^{m\times n}$ 的范数记作 $\|\boldsymbol{A}\|$，它是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的实值函数，必须具有以下性质：

(1) 对于任何非零矩阵 $\boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{O}$，其范数大于零，即 $\|\boldsymbol{A}\| > 0$，并且 $\|\boldsymbol{O}\| = 0$。

(2) 对于任意复数 c 有 $\|c\boldsymbol{A}\| = |c|\|\boldsymbol{A}\|$。

(3) 矩阵范数满足三角不等式 $\|\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\| + \|\boldsymbol{B}\|$。

(4) 两个矩阵乘积的范数小于或等于两个矩阵范数的乘积，即 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{B}\|$。

例 1.4.2　考查 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的实值函数

$$f(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$

容易验证：

(1) $f(\boldsymbol{A}) \geqslant 0$，并且当 $\boldsymbol{A} = 0$ 即 $a_{ij} \equiv 0$ 时 $f(\boldsymbol{A}) = 0$。

(2) $f(c\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|ca_{ij}| = |c|\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}| = |c|f(\boldsymbol{A})$。

(3) $f(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(|a_{ij}+b_{ij}|)\leqslant\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(|a_{ij}|+|b_{ij}|)=f(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})$。

(4) 对于两个矩阵的乘积，有

$$
\begin{aligned}
f(\boldsymbol{AB}) &= \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left|\sum_{k=1}^{n}a_{ik}b_{kj}\right| \\
&\leqslant \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}||b_{kj}| \\
&\leqslant \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\left(\sum_{k=1}^{n}|a_{ik}|\sum_{l=1}^{n}|b_{kl}|\right) \\
&= f(\boldsymbol{A})f(\boldsymbol{B})
\end{aligned}
$$

因此，实函数 $f(\boldsymbol{A})=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$ 是一种矩阵范数。

下面是几种典型的矩阵范数 [224]。

(1) Frobenius 范数

$$
\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right)^{1/2} \tag{1.4.38}
$$

这一定义可以视为向量的 Euclidean 范数对按照矩阵各行排列的“长向量”

$$
\boldsymbol{x}=[a_{11},\cdots,a_{1n},a_{21},\cdots,a_{2n},\cdots,a_{m1},\cdots,a_{mn}]^{\mathrm{T}}
$$

的推广。矩阵的 Frobenius 范数也称 Euclidean 范数、Schur 范数、Hilbert-Schmidt 范数或者 l_2 范数。

(2) l_p 范数

$$
\|\boldsymbol{A}\|_p \stackrel{\mathrm{def}}{=} \max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\|\boldsymbol{Ax}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p} \tag{1.4.39}
$$

式中，$\|\boldsymbol{x}\|_p$ 是向量 $\boldsymbol{x}$ 的 l_p 范数，由式 (1.4.6) 定义。l_p 范数也称 Minkowski p 范数，或者简称 p 范数。

(3) 行和范数 (row-sum norm)

$$
\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{row}} = \max_{1\leqslant i\leqslant m}\left\{\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|\right\} \tag{1.4.40}
$$

(4) 列和范数 (column-sum norm)

$$
\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{col}} = \max_{1\leqslant j\leqslant n}\left\{\sum_{i=1}^{m}|a_{ij}|\right\} \tag{1.4.41}
$$

(5) 谱范数 (spectrum norm)

$$
\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{spec}} = \sigma_{\max} = \sqrt{\lambda_{\max}} \tag{1.4.42}
$$

式中，$\sigma_{\max}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最大奇异值，即 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 的最大特征值 $\lambda_{\max}$ 的正平方根。谱范数也称最大奇异值范数或者算子范数 (operator norm)。

(6) Mahalanobis 范数

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\Omega} = \sqrt{\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Omega}\boldsymbol{A})} \tag{1.4.43}$$

式中，$\boldsymbol{\Omega}$ 为正定矩阵 (所有特征值大于零的矩阵)。

可以看出，$m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的范数与向量的范数有所不同。

注意，向量 $\boldsymbol{x}$ 的 l_p 范数 $\|\boldsymbol{x}\|_p$ 相当于该向量的长度。当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 作用于长度为 $\|\boldsymbol{x}\|_p$ 的向量 $\boldsymbol{x}$ 时，得到线性变换结果为向量 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，其长度为 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_p$。线性变换矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可视为一线性放大器算子。因此，比率 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_p/\|\boldsymbol{x}\|_p$ 提供了线性变换 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 相对于 $\boldsymbol{x}$ 的放大倍数，而矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 p 范数 $\|\boldsymbol{A}\|_p$ 是由 $\boldsymbol{A}$ 产生的最大放大倍数。类似地，放大器算子 $\boldsymbol{A}$ 的最小放大倍数由

$$\min|\boldsymbol{A}|_p \stackrel{\mathrm{def}}{=} \min_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}} \frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_p}{\|\boldsymbol{x}\|_p} \tag{1.4.44}$$

给出。比率 $\|\boldsymbol{A}\|_p/\min|\boldsymbol{A}|_p$ 描述放大器算子 $\boldsymbol{A}$ 的“动态范围”。

若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 是 $m \times n$ 矩阵，则矩阵的范数具有以下性质：

$$\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\| + \|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\| = 2(\|\boldsymbol{A}\|^2 + \|\boldsymbol{B}\|^2) \quad (\text{平行四边形法则}) \tag{1.4.45}$$

$$\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\|\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|^2 + \|\boldsymbol{B}\|^2 \tag{1.4.46}$$

与矩阵的范数密切相关的量是矩阵的内积。对任意 $m \times n$ 复矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，矩阵的内积记作 $\langle\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\rangle$，定义为

$$\langle\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\rangle = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B} \tag{1.4.47}$$

以下是矩阵的内积与范数之间的关系 [224]。

(1) Cauchy-Schwartz 不等式

$$|\langle\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\rangle|^2 \leqslant \|\boldsymbol{A}\|^2\|\boldsymbol{B}\|^2 \tag{1.4.48}$$

等号成立，当且仅当 $\boldsymbol{A} = c\boldsymbol{B}$，其中，$c$ 是某个复常数。

(2) Pathagoras 定理

$$\langle\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\rangle = 0 \Rightarrow \|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\|^2 = \|\boldsymbol{A}\|^2 + \|\boldsymbol{B}\|^2 \tag{1.4.49}$$

(3) 极化恒等式

$$\mathrm{Re}\left(\langle\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\rangle\right) = \frac{1}{4}\left(\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\|^2 - \|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|^2\right) \tag{1.4.50}$$

$$\mathrm{Re}\left(\langle\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\rangle\right) = \frac{1}{2}\left(\|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}\|^2 - \|\boldsymbol{A}\|^2 - \|\boldsymbol{B}\|^2\right) \tag{1.4.51}$$

式中，$\mathrm{Re}(\cdot)$ 表示取复数的实部。

1.5 基与 Gram-Schmidt 正交化

虽然 n 阶 Euclidean 空间 R^n 只有一个，但 n 阶向量空间却有很多。例如，对所有实数 α,β,γ，向量 $\boldsymbol{x}=[0,0,\alpha,\beta,\gamma]^{\mathrm{T}}$ 的集合 W_1 是一个 5 阶向量空间，即 W_1 内的每一个向量都属于 R^5 空间。然而，向量 $\boldsymbol{y}=[1,5,\alpha,\beta,\gamma]^{\mathrm{T}}$ 却不属于向量空间 W_1，尽管它仍然在 5 阶 Euclidean 空间 R^5 内。因此，可以称 W_1 是 R^5 内的一个子空间。本节讨论如何生成所希望的向量子空间这一重要问题。

1.5.1 向量子空间的基

根据向量空间的定义易知，R^n 空间的多个向量的所有线性组合也属于 R^n。例如，考虑 R^n 的三个 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3$。对于实数 a_1,a_2,a_3，由闭合性 (c2) 知，$a_1\boldsymbol{x}_1$ 和 $a_2\boldsymbol{x}_2$ 均位于 Euclidean n 空间 R^n。又由闭合性 (c1)，$a_1\boldsymbol{x}_1+a_2\boldsymbol{x}_2$ 在 R^n 内。类似地，可以证明 $(a_1\boldsymbol{x}_1+a_2\boldsymbol{x}_2)+a_3\boldsymbol{x}_3$ 也在 R^n 内。这启迪我们，若 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3$ 是 R^n 中的三个线性无关的向量，则 R^n 中可以用这三个线性无关向量的线性组合表示的所有向量构成 R^n 的一个子空间。从这个意义上讲，可以认为这三个线性无关向量的集合 $\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3\}$ 张成 (span) 或生成 (generate) 了 Euclidean n 空间 R^n 的一个子空间。推而广之，可引出下面的子空间定义。

定义 1.5.1 向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_d$ 的所有线性组合的集合称为由 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_d$ 张成 (或生成) 的子空间或闭包 (closure)，记作

$$W=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_d\}=\mathrm{Close}\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_d\} \tag{1.5.1}$$

向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_d$ 称为子空间 W 的张成集 (spanning set) 或生成元 (generator)。

容易验证，向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_d$ 的所有线性组合的集合满足定理 1.5.1 关于一个子空间的判断条件。需要注意的是，一个子空间的张成集并不是唯一的。显然，子空间 W 内所有向量的集合也生成子空间 W。这样一种向量集合称为子空间 W 的平凡张成集或平凡生成元。在矩阵分析及其应用中，重要的是寻找生成一个子空间 W 的生成元的最小集合，即 W 只需要用 d 个向量即可生成。这就引出了子空间的基向量的概念。

定义 1.5.2 生成子空间 W 的线性无关的向量 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_d\}$ 称为子空间 W 的基向量 (basis vectors) 或简称为基。生成子空间 W 的基向量的个数称为子空间 W 的维数，即有

$$d=\dim(\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_d\}) \tag{1.5.2}$$

应当注意的是，$\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_d\}$ 只是子空间 W 的一组基，并非唯一的基。这是因为，对于 n 阶向量空间的一个 d 维子空间 W 而言，向量空间 V 中任何 d 个线性无关向

量的集合都张成子空间 W。虽然一个子空间可能存在许多基的选择，但是所有基都具有相同的向量个数。

例如，R^3 子空间既可以由基向量

$$\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{e}_3=\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$$

生成，也可以由基向量

$$\boldsymbol{u}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{u}_2=\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{u}_3=\begin{bmatrix}0\\1\\1\end{bmatrix}$$

生成。这是因为 R^3 内的任意一个向量 $[a,b,c]^{\mathrm{T}}$ 都可以写成线性组合

$$\begin{bmatrix}a\\b\\c\end{bmatrix}=a\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}+b\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}+c\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$$

或

$$\begin{bmatrix}a\\b\\c\end{bmatrix}=\alpha\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}+\beta\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}+\gamma\begin{bmatrix}0\\1\\1\end{bmatrix}$$

式中，只要选择

$$\gamma=c,\quad \beta=b-\gamma=b-c,\quad \alpha=a-\beta=a-b+c$$

即可。例如

$$\boldsymbol{e}_1=\begin{bmatrix}1\\0\\\vdots\\0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{e}_2=\begin{bmatrix}0\\1\\\vdots\\0\end{bmatrix},\quad \cdots,\quad \boldsymbol{e}_n=\begin{bmatrix}0\\0\\\vdots\\1\end{bmatrix}$$

是 Euclidean n 空间 R^n 的一组基向量，因为任何一个向量 $\boldsymbol{x}=[x(1),x(2),\cdots,x(n)]^{\mathrm{T}}\in R^n$ 都可以用 $\boldsymbol{e}_i$ 向量表示为

$$\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}x_i\boldsymbol{e}_i=[x(1),x(2),\cdots,x(n)]^{\mathrm{T}}$$

定义 1.5.3 若 $\{\boldsymbol{\alpha}_1,\boldsymbol{\alpha}_2,\cdots,\boldsymbol{\alpha}_n\}$ 和 $\{\boldsymbol{\beta}_1,\boldsymbol{\beta}_2,\cdots,\boldsymbol{\beta}_n\}$ 是两组不同的基，并且 $\boldsymbol{\alpha}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\beta}_i=0$，则称其中一组基是另外一组基的对偶基 (dual basis)。

定义 1.5.4 令 $\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n\}$ 是子空间 $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n\}$ 的基向量。若这些基向量满足正交条件

$$\langle\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j\rangle=\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j=0,\quad \forall\, i\neq j \tag{1.5.3}$$

则称这些基向量为正交基向量。

定义 1.5.5 若正交基向量 $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n\}$ 中所有向量的范数均等于 1，即

$$\|\boldsymbol{x}_i\| = 1, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{1.5.4}$$

则称为标准正交基向量 (orthonormal basis vectors)。

例 1.5.1 (Fourier 级数的正交基) 如果标量函数 $x(t)$ 为周期函数，其周期为 T，且函数是绝对平方可积分的，即

$$\int_{-\infty}^{\infty} |x(t)|^2 \mathrm{d}t < \infty$$

则函数 $x(t)$ 可以用 Fourier 展开表示为

$$x(t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} c_n \mathrm{e}^{\mathrm{j}\, n\omega_0 t} \tag{1.5.5}$$

其中，$\omega_0 = 2\pi/T$。因此，上述 Fourier 级数的正交基是

$$1, \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_0 t}, \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,2\omega_0 t}, \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,3\omega_0 t}, \cdots$$

容易验证，它们是一组标准正交基向量。

例 1.5.2 为了将时变信号的不连续性隔离开，实现信号的多分辨率分析，小波变换通过平移和伸缩单个原像小波 $h(\cdot)$，得到基函数

$$h_{a,b}(t) = \frac{1}{\sqrt{a}} h\left(\frac{t-b}{a}\right), \quad a \in R^+(\text{正的实数集合}) \tag{1.5.6}$$

其中，a 和 b 分别为伸缩和平移参数。通过改变伸缩参数 a 的大小，即可构造持续时间很短的高频基函数和持续时间较长的低频基函数。信号 $x(t)$ 的离散小波变换定义为

$$\mathrm{WT}_x(m, n) = a_0^{-m/2} \int_{-\infty}^{\infty} x(t) h(a_0^{-m} t - n b_0) \mathrm{d}t \tag{1.5.7}$$

其标准正交基由 Haar 基

$$h(t) = \begin{cases} 1, & 0 \leqslant t < 1/2 \\ -1, & 1/2 \leqslant t < 1 \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \tag{1.5.8}$$

和 $a_0 = 2, b_0 = 1$ 给出。

向量空间的子空间具有以下性质。

(1) 设 W_1 和 W_2 是向量空间 V 中的两个子空间，则它们的交集 $W_1 \cap W_2$ 也是 V 的子空间。

证明 因为 $\mathbf{0} \in W_1$ 和 $\mathbf{0} \in W_2$，故有 $\mathbf{0} \in (W_1 \cap W_2)$，即交集 $W_1 \cap W_2$ 非空。令 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in (W_1 \cap W_2)$，则由 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in W_1$ 和 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in W_2$ 知，对于任意 $\alpha, \beta \in S$，恒有

$$\alpha\boldsymbol{x} + \beta\boldsymbol{y} \in W_1 \quad \text{和} \quad \alpha\boldsymbol{x} + \beta\boldsymbol{y} \in W_2$$

故有 $\alpha\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{y}\in(W_1\cap W_2)$。因此，由定义 1.5.2 知 $W_1\cap W_2$ 是向量空间 V 的子空间。■

(2) 设 W_1 和 W_2 是向量空间 V 中的子空间，则和 W_1+W_2 也是 V 的子空间。

证明 显然 $\boldsymbol{0}\in(W_1+W_2)$，即 W_1+W_2 非空。假定 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in(W_1+W_2)$，则存在 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{y}_1\in W_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{y}_2\in W_2$，使得 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{x}_2$ 和 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}_1+\boldsymbol{y}_2$。于是，对于所有 $\alpha,\beta\in S$，有

$$\alpha\boldsymbol{x}_1+\beta\boldsymbol{y}_1\in W_1 \quad 和 \quad \alpha\boldsymbol{x}_2+\beta\boldsymbol{y}_2\in W_2$$

由此得

$$\alpha\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{y}=(\alpha\boldsymbol{x}_1+\beta\boldsymbol{y}_1)+(\alpha\boldsymbol{x}_2+\beta\boldsymbol{y}_2)\in W_1+W_2$$

据定义 1.5.2 知，W_1+W_2 也是向量空间 V 的子空间。■

1.5.2 Gram-Schmidt 正交化

如前所述，线性无关的向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 构成 n 维向量子空间 $\text{Span}\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n\}$ 的基向量。在许多应用中，往往希望基是标准正交的。

下面的定理给出了将 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 转换为标准正交向量组 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n\}$ 的方法，称为 Gram-Schmidt 正交化。

定理 1.5.1 令 $\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n\}$ 是 p 维向量子空间 W 的任意一组基 (即线性无关的向量)。于是，子空间 W 的标准正交基 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n\}$ 可以通过 Gram-Schmidt 正交化构造如下：

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{p}_1=\boldsymbol{x}_1, \qquad \boldsymbol{u}_1=\frac{\boldsymbol{p}_1}{\|\boldsymbol{p}_1\|}=\frac{\boldsymbol{x}_1}{\|\boldsymbol{x}_1\|}\\ &\boldsymbol{p}_k=\boldsymbol{x}_k-\sum_{i=1}^{k-1}(\boldsymbol{u}_i^{\rm H}\boldsymbol{x}_k)\boldsymbol{u}_i, \qquad \boldsymbol{u}_k=\frac{\boldsymbol{p}_k}{\|\boldsymbol{p}_k\|}\end{aligned} \tag{1.5.9}$$

式中，$2\leqslant k\leqslant n$。

证明 (1) 使用数学归纳法证明由式 (1.5.9) 构造的向量 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$ 全部都是非零和有限大的向量。

由于 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 是一组基，它们都是非零向量，故向量 $\boldsymbol{u}_1=\boldsymbol{x}_1/\|\boldsymbol{x}_1\|$ 是非零向量。因此，内积 $\boldsymbol{u}_1^{\rm H}\boldsymbol{u}_1=1$。又由于 $\boldsymbol{x}_i$ 是非正交的，于是有 $\boldsymbol{u}_1^{\rm H}\boldsymbol{x}_2=\boldsymbol{x}_1^{\rm H}\boldsymbol{x}_2/\|\boldsymbol{x}_1\|\neq 0$。考虑由式 (1.5.9) 构造的向量

$$\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{x}_2-(\boldsymbol{u}_1^{\rm H}\boldsymbol{x}_2)\boldsymbol{u}_1=\boldsymbol{x}_2-\frac{\boldsymbol{x}_1^{\rm H}\boldsymbol{x}_2}{\|\boldsymbol{x}_1\|^2}\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{x}_2-c\boldsymbol{x}_1$$

式中，$c=\boldsymbol{x}_1^{\rm H}\boldsymbol{x}_2/\|\boldsymbol{x}_1\|^2\neq 0$，并且有限大。由于 $\boldsymbol{x}_2$ 和 $\boldsymbol{x}_1$ 线性无关，故 $\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{x}_2-c\boldsymbol{x}_1\neq\boldsymbol{0}$，且有限大，从而 $\boldsymbol{u}_2=\boldsymbol{p}_2/\|\boldsymbol{p}_2\|$ 是有限大的非零向量。假定由式 (1.5.9) 构造的 $\boldsymbol{p}_{n-1}$ (从而 $\boldsymbol{u}_{n-1}$) 是非零和有限大的向量，则

$$\boldsymbol{p}_n=\boldsymbol{x}_n-\sum_{i=1}^{n-1}(\boldsymbol{u}_i^{\rm H}\boldsymbol{x}_n)\boldsymbol{u}_i=\boldsymbol{x}_n-\sum_{i=1}^{n-1}\frac{\boldsymbol{p}_i^{\rm H}\boldsymbol{x}_n}{\|\boldsymbol{p}_i\|^2}\boldsymbol{p}_i$$

是有限大的，因为 $\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\cdots,\boldsymbol{p}_{n-1}$ 全部是非零向量，即 $\|\boldsymbol{p}_i\|^2\neq 0,\ i=1,2\cdots,n-1$。另一方面，由于 $\boldsymbol{p}_n$ 是由 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 构造的，故可以将 $\boldsymbol{p}_n$ 写作

$$\boldsymbol{p}_n=\boldsymbol{x}_n-c_1\boldsymbol{x}_1-\cdots-c_{n-1}\boldsymbol{x}_{n-1}$$

然而，由于 $\boldsymbol{x}_i$ 之间的线性无关性，不存在全部非零的 c_i 使得

$$\boldsymbol{x}_n=c_1\boldsymbol{x}_1+\cdots+c_{n-1}\boldsymbol{x}_{n-1}$$

即 $\boldsymbol{p}_n$ 一定是非零的，从而 $\boldsymbol{u}_n$ 一定是有限大的非零向量。

(2) 再使用数学归纳法证明 $\boldsymbol{p}_i$ 之间的正交性。

记住 $\boldsymbol{p}_1=\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{u}_1=\boldsymbol{x}_1/\|\boldsymbol{x}_1\|$，容易验证：

$$\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{H}}\left[\boldsymbol{x}_2-(\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_2)\boldsymbol{u}_1\right]=\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_2-\frac{\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_2}{\|\boldsymbol{x}_1\|^2}\boldsymbol{x}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_1=0$$

假设 $\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\cdots,\boldsymbol{p}_{n-1}$ 正交。由式 (1.5.9) 知，对于 $j<n$，有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{p}_n&=\boldsymbol{p}_j^{\mathrm{H}}\left[\boldsymbol{x}_n-\sum_{i=1}^{n-1}(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_n)\boldsymbol{u}_i\right]=\boldsymbol{p}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_n-\sum_{i=1}^{n-1}\left(\frac{\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_n}{\|\boldsymbol{p}_i\|}\right)\left(\frac{\boldsymbol{p}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{p}_i}{\|\boldsymbol{p}_i\|}\right)\\&=\boldsymbol{p}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_n-\boldsymbol{p}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_n=0\end{aligned}$$

因为

$$\boldsymbol{p}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{p}_i=\begin{cases}\boldsymbol{p}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{p}_j, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases}$$

这就证明了由式 (1.5.9) 构造的基向量 $\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2,\cdots,\boldsymbol{p}_n$ 相互正交。再由 $\boldsymbol{u}_i=\boldsymbol{p}_i/\|\boldsymbol{p}\|$ 易知，$\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$ 相互正交，且每个向量的范数等于 1，即它们组成标准正交基。 ■

式 (1.5.9) 所示算法称为经典 Gram-Schmidt 正交化算法。

例 1.5.3 令 $W=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\}$ 是 R^3 的子空间，其中

$$\boldsymbol{x}_1=\begin{bmatrix}1\\1\\2\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{x}_2=\begin{bmatrix}0\\2\\-7\end{bmatrix}$$

利用经典 Gram-Schmidt 正交化算法构造子空间 W 的正交基和标准正交基。

解 令所构造的 W 子空间的正交基向量为 $\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2$。根据 Gram-Schmidt 正交化过程，定义 $\boldsymbol{p}_1=\boldsymbol{x}_1$, $\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{x}_2+a\boldsymbol{p}_1$，其中，常数 a 根据正交条件 $\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_2=0$ 确定。由

$$\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}_2+a\boldsymbol{p}_1)=\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_2+a\boldsymbol{p}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_1=-12+6a=0$$

得 $a=2$。当 $a=1$ 时，$\boldsymbol{p}_2=\boldsymbol{x}_2+2\boldsymbol{p}_1=[1,4,0]^{\mathrm{T}}$。因此，$W$ 子空间的正交基为 $\boldsymbol{B}=\{\boldsymbol{p}_1,\boldsymbol{p}_2\}$，其中

$$\boldsymbol{p}_1=\begin{bmatrix}1\\1\\2\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{p}_2=\begin{bmatrix}1\\4\\0\end{bmatrix}$$

标准正交基为

$$\boldsymbol{u}_1=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{6}}\\ \frac{1}{\sqrt{6}}\\ \frac{2}{\sqrt{6}}\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{u}_2=\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{17}}\\ \frac{4}{\sqrt{17}}\\ 0\end{bmatrix}$$

经典 Gram-Schmidt 正交化算法的主要缺点是其数值性能有时不好。相比之下，Björck 的修正 Gram-Schmidt 正交化算法 [46] 具有更好的性能。这一修正算法的基本思想如下。

第一步，和经典算法一样，先构造第一个向量

$$\boldsymbol{u}_1=\frac{\boldsymbol{x}_1}{\|\boldsymbol{x}_1\|}$$

再对其他数据向量 $\boldsymbol{x}_2,\boldsymbol{x}_3,\cdots,\boldsymbol{x}_n$ 进行修正，以便保证修正后的数据向量

$$\boldsymbol{x}_i^{(1)}=\boldsymbol{x}_i-(\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_i)\boldsymbol{u}_1,\quad i=2,3,\cdots,n$$

与 $\boldsymbol{u}_1$ 正交，即 $\boldsymbol{x}_i^{(1)}\perp\boldsymbol{u}_1, i=2,3,\cdots,n$。

第二步，构造第二个向量

$$\boldsymbol{u}_2=\frac{\boldsymbol{x}_2^{(1)}}{\|\boldsymbol{x}_2^{(1)}\|}$$

它已经与 $\boldsymbol{u}_1$ 正交。然后，再对剩余的向量 $\boldsymbol{x}_3^{(1)},\boldsymbol{x}_4^{(1)},\cdots,\boldsymbol{x}_n^{(1)}$ 进行修正，以使得修正后的向量

$$\boldsymbol{x}_i^{(2)}=\boldsymbol{x}_i^{(1)}-(\boldsymbol{u}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_i^{(1)})\boldsymbol{u}_2,\quad i=3,4,\cdots,n$$

与 $\boldsymbol{u}_2$ 正交，即 $\boldsymbol{x}_i^{(2)}\perp\boldsymbol{u}_2, i=3,4,\cdots,n$。

与第一步和第二步相类似，第 k 个正交化的向量定义为

$$\boldsymbol{u}_k=\frac{\boldsymbol{x}_k^{(k-1)}}{\|\boldsymbol{x}_k^{(k-1)}\|}$$

并得到被修正的数据向量

$$\boldsymbol{x}_i^{(k)}=\boldsymbol{x}_i^{(k-1)}-(\boldsymbol{u}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_i^{(k-1)})\boldsymbol{u}_k,\quad i=k+1,k+2,\cdots,n$$

直至得到正交化向量 $\boldsymbol{u}_n$ 为止。

令 $\boldsymbol{X}=[\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n]$，则修正 Gram-Schmidt 正交化算法可以利用 MATLAB 函数 U=mgs(X) 实现。

1.6 矩阵的标量函数

矩阵的很多性质可以使用标量函数描述。前面介绍的矩阵范数的定义形式尽管有多种，但它们都是矩阵的标量函数。本节将介绍矩阵的其他几个重要的标量函数。这些标量函数是：矩阵的二次型、迹、行列式和秩。

1.6.1 矩阵的二次型

任意一个正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 是一实标量。以实矩阵为例，考查二次型

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} &= [x_1, x_2, x_3]\begin{bmatrix}1 & 4 & 2\\ -1 & 7 & 5\\ -1 & 6 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}\\ &= x_1^2 - x_2x_1 - x_3x_1 + 4x_1x_2 + 7x_2^2 + 6x_3x_2 + 2x_1x_3 + 5x_2x_3 + 3x_3^2\\ &= x_1^2 + 7x_2^2 + 3x_3^2 + 3x_1x_2 + x_1x_3 + 11x_2x_3\end{aligned}$$

这是变元 x 的二次型函数，故称 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的二次型。

推而广之，若 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^{\mathrm{T}}$，且 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的元素为 a_{ij}，则二次型

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} x_i x_j a_{ij} \tag{1.6.1}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} a_{ii}x_i^2 + \sum_{i=1,\, i\neq j}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_i x_j \tag{1.6.2}$$

$$= \sum_{i=1}^{n} a_{ii}x_i^2 + \sum_{i=1}^{n-1}\sum_{j=i+1}^{n} (a_{ij} + a_{ji})x_i x_j \tag{1.6.3}$$

根据这一公式，显然

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix}1 & 4 & 2\\ -1 & 7 & 5\\ -1 & 6 & 3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix}1 & -1 & -1\\ 4 & 7 & 6\\ 2 & 5 & 3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{C} = \begin{bmatrix}1.0 & 1.5 & 0.5\\ 1.5 & 7.0 & 5.5\\ 0.5 & 5.5 & 3.0\end{bmatrix},$$

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix}1 & 114 & 52\\ -111 & 7 & 2\\ -51 & 9 & 3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{F} = \begin{bmatrix}1 & 114 & 52\\ -111 & 7 & 4\\ -51 & 7 & 3\end{bmatrix},\quad \cdots$$

具有相同的二次型，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{F}\boldsymbol{x}\\ &= x_1^2 + 7x_2^2 + 3x_3^2 + 3x_1x_2 + x_1x_3 + 11x_2x_3\end{aligned}$$

这就是说，对于任何一个二次型函数

$$f(x_1, x_2, \cdots, x_n) = \sum_{i=1}^{n} \alpha_{ii}x_i^2 + \sum_{i=1,\, i\neq j}^{n}\sum_{j=1}^{n} \alpha_{ij}x_i x_j$$

存在许多矩阵 $\boldsymbol{A}$，它们的二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$ 相同。但是，只有一个唯一的对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满足 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$，其元素为 $a_{ii} = \alpha_{ii}$ 和 $a_{ij} = a_{ji} = \frac{1}{2}(\alpha_{ij} + \alpha_{ji})$，其中，$i = 1, 2, \cdots, n,\ j = 1, 2, \cdots, n,\ i \neq j$。因此，在讨论矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的二次型时，通常都假定 $\boldsymbol{A}$ 为实对称矩阵或复共轭对称 (即 Hermitian) 矩阵。

如果将大于零的二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 称为正定的二次型，则与之对应的 Hermitian 矩阵称为正定矩阵。类似地，还可以定义 Hermitian 矩阵的半正定性、负定性和半负定性。

定义 1.6.1 一个复共轭对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为

正定矩阵，若　二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0, \quad \forall \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$;

半正定矩阵，若　二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \geqslant 0, \quad \forall \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ (也称非负定的)；

负定矩阵，若　二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} < 0, \quad \forall \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$;

半负定矩阵，若　二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \leqslant 0, \quad \forall \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ (也称非正定的)；

不定矩阵，若　二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 既可能取正值，也可能取负值。

例 1.6.1 实对称矩阵

$$\boldsymbol{R} = \begin{bmatrix} 3 & -1 & 0 \\ -1 & 3 & -1 \\ 0 & -1 & 3 \end{bmatrix}$$

是正定的，因为二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{x} = 2x_1^2 + x_2^2 + 2x_3^2 + (x_1 - x_2)^2 + (x_2 - x_3)^2 > 0$，除非 $x_1 = x_2 = x_3 = 0$。

这里有必要引出与正定矩阵存在一字之差的另外一种矩阵的概念。

定义 1.6.2 设矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的元素为 a_{ij}。称 $\boldsymbol{A}$ 为非负矩阵 (nonnegative matrix)，若

$$a_{ij} \geqslant 0, \quad \forall\, i = 1, 2, \cdots, m,\ j = 1, 2, \cdots, n \tag{1.6.4}$$

即 $\boldsymbol{A}$ 的所有元素是非负的。若上式中严格的不等式成立，即 $\boldsymbol{A}$ 的所有元素为正，则称 $\boldsymbol{A}$ 为正矩阵 (positive matrix)。

非负矩阵和正矩阵常分别用符号 $\boldsymbol{A} \geqslant 0$ 和 $\boldsymbol{A} > 0$ 简记。下面是正定矩阵与正矩阵之间的区别：

(1) 正定矩阵限定为正方矩阵，而正矩阵可以是非正方的矩阵。

(2) 正定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 由其二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0, \forall\, \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$ 定义，而正矩阵则由其元素 $a_{ij} > 0$ 定义。

(3) 正定矩阵常用符号 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} > 0$ 表示，而正矩阵则用符号 $\boldsymbol{A} > 0$ 表示。

然而，在有些文献中，也用符号 $\boldsymbol{A} > 0$ 和 $\boldsymbol{A} \geqslant 0$ 分别表示正定矩阵和半正定矩阵，用 $\boldsymbol{A} < 0$ 和 $\boldsymbol{A} \leqslant 0$ 分别表示负定矩阵和半负定矩阵，需注意加以区别。

关于二次型，有下面的结果 (称为 Debreu 引理)。

引理 1.6.1[115] 给定 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{J}$ 和 $n \times n$ 对称矩阵 $\boldsymbol{H}$。二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\boldsymbol{x} > 0$ 对所有满足 $\boldsymbol{J}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的向量 $\boldsymbol{x}$ 成立，当且仅当存在一个有限大的数 $\bar{\rho} \geqslant 0$，使得 $\boldsymbol{H} + \rho\boldsymbol{J}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}$ 对所有 $\rho > \bar{\rho}$ 都是正定的。

1.6.2 矩阵的迹

定义 1.6.3 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的对角元素之和称为 $\boldsymbol{A}$ 的迹 (trace)，记作 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$，即

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{nn} = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} \tag{1.6.5}$$

例 1.6.2 矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 3 & 2\\ -1 & 5 & 1\\ 3 & 0 & 7\end{bmatrix}$$

的迹为 $\text{tr}(\boldsymbol{A})=1+5+7=13$。

非正方矩阵无迹的定义。下面是矩阵的迹满足的等式、不等式关系与一些性质。

1. 关于迹的等式 [290]

(1) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 $n\times n$ 矩阵，则 $\text{tr}(\boldsymbol{A}\pm\boldsymbol{B})=\text{tr}(\boldsymbol{A})\pm\text{tr}(\boldsymbol{B})$。

(2) 若 c 是一个复或者实的常数，则 $\text{tr}(c\boldsymbol{A})=c\,\text{tr}(\boldsymbol{A})$。

(3) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 $n\times n$ 矩阵，并且 c_1 和 c_2 为常数，则 $\text{tr}(c_1\boldsymbol{A}\pm c_2\boldsymbol{B})=c_1\text{tr}(\boldsymbol{A})\pm c_2\text{tr}(\boldsymbol{B})$。

(4) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的转置、复数共轭和复共轭转置的迹分别为

$$\text{tr}(\boldsymbol{A}^{\text{T}})=\text{tr}(\boldsymbol{A})$$

$$\text{tr}(\boldsymbol{A}^{*})=[\text{tr}(\boldsymbol{A})]^{*}$$

$$\text{tr}(\boldsymbol{A}^{\text{H}})=[\text{tr}(\boldsymbol{A})]^{*}$$

(5) 迹是相似不变量：若 $\boldsymbol{A}$ 为 $m\times n$ 矩阵，且 $\boldsymbol{B}$ 为 $n\times m$ 矩阵，则

$$\text{tr}(\boldsymbol{AB})=\text{tr}(\boldsymbol{BA})$$

(6) 若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 $m\times m$ 矩阵，并且 $\boldsymbol{B}$ 非奇异，则

$$\text{tr}(\boldsymbol{BAB}^{-1})=\text{tr}(\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{AB})=\text{tr}(\boldsymbol{A})$$

(7) 若 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，则 $\text{tr}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A})=0\Leftrightarrow\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O}_{m\times n}$ (零矩阵)。

(8) $\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\text{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\text{H}})$ 和 $\boldsymbol{y}^{\text{H}}\boldsymbol{x}=\text{tr}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\text{H}})$。

(9) 分块矩阵的迹满足

$$\text{tr}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}=\text{tr}(\boldsymbol{A})+\text{tr}(\boldsymbol{D})$$

式中，$\boldsymbol{A}\in C^{m\times m},\boldsymbol{B}\in C^{m\times n},\boldsymbol{C}\in C^{n\times m},\boldsymbol{D}\in C^{n\times n}$。

(10) 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 的迹相等，且有

$$\text{tr}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A})=\text{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\text{H}})=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}^{*}a_{ji}\tag{1.6.6}$$

(11) 迹等于特征值之和，即

$$\text{tr}(\boldsymbol{A})=\lambda_1+\lambda_2+\cdots+\lambda_n\tag{1.6.7}$$

(12) 对于任何正整数 k，有

$$\text{tr}(\boldsymbol{A}^{k})=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i^{k}\tag{1.6.8}$$

式右的和称为 $\boldsymbol{A}$ 的诸特征值的 k 次矩。

2. 关于迹的不等式 [290]

(1) 对一个复矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}$，有 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) \geqslant 0$。

(2) 若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 均为 $m \times n$ 矩阵，则

$$\mathrm{tr}[(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})^2] \leqslant \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}) \quad \text{(Cauchy-Schwartz 不等式)}$$

$$\mathrm{tr}[(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})^2] \leqslant \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})$$

$$\mathrm{tr}[(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})^2] \leqslant \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})$$

(3) Schur 不等式：$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^2) \leqslant \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})$。

(4) $\mathrm{tr}[(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}}] \leqslant 2[\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) + \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})]$。

(5) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 为 $m \times m$ 对称矩阵，则 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}) \leqslant \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^2 + \boldsymbol{B}^2)$。

类似于向量的 Euclidean 范数 $\|\boldsymbol{x}\| = (\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})^{1/2}$，一个 $m \times n$ 实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Frobenius 范数也可利用 $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 或者 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的迹定义为 [296, p.10]

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}} = \sqrt{\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})} = \sqrt{\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})} \tag{1.6.9}$$

1.6.3 行列式

一个 $n \times n$ 正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式记作 $\det(\boldsymbol{A})$ 或 $|\boldsymbol{A}|$，定义为

$$\det(\boldsymbol{A}) = |\boldsymbol{A}| = \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{vmatrix} \tag{1.6.10}$$

若 $\boldsymbol{A} = \{a\} \in C^{1\times 1}$，则它的行列式由 $\det(\boldsymbol{A}) = a$ 给出。

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 去掉第 i 行和第 j 列之后得到的剩余行列式记作 A_{ij}，称为元素 a_{ij} 的余子式 (cofactor)。特别地，当 $j = i$ 时，$A_i = A_{ii}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的主子式。若令 $\boldsymbol{A}_{ij}$ 是 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 删去第 i 行和第 j 列之后得到的 $(n-1)\times(n-1)$ 子矩阵，则

$$A_{ij} = (-1)^{i+j}\det(\boldsymbol{A}_{ij}) \tag{1.6.11}$$

一个 $n \times n$ 矩阵的行列式等于其任意行 (或列) 的元素与相对应的余子式乘积之和，即

$$\det(\boldsymbol{A}) = a_{i1}A_{i1} + a_{i2}A_{i2} + \cdots + a_{in}A_{in} = \sum_{j=1}^{n} a_{ij}(-1)^{i+j}\det(\boldsymbol{A}_{ij}) \tag{1.6.12}$$

或者

$$\det(\boldsymbol{A}) = a_{1j}A_{1j} + a_{2j}A_{2j} + \cdots + a_{nj}A_{nj} = \sum_{i=1}^{n} a_{ij}(-1)^{i+j}\det(\boldsymbol{A}_{ij}) \tag{1.6.13}$$

因此，行列式需要递推计算：n 阶行列式由 $(n-1)$ 阶行列式计算，$(n-1)$ 阶行列式又由 $(n-2)$ 行列式计算等。

特别地，对于 3×3 矩阵 $\boldsymbol{A}$，其行列式可以通过

$$\begin{aligned}\det(\boldsymbol{A}) &= \det\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & a_{13}\\ a_{21} & a_{22} & a_{23}\\ a_{31} & a_{32} & a_{33}\end{bmatrix} = a_{11}A_{11}+a_{12}A_{12}+a_{13}A_{13}\\ &= a_{11}(-1)^{1+1}\begin{vmatrix}a_{22} & a_{23}\\ a_{32} & a_{33}\end{vmatrix} + a_{12}(-1)^{1+2}\begin{vmatrix}a_{21} & a_{23}\\ a_{31} & a_{33}\end{vmatrix} + a_{13}(-1)^{1+3}\begin{vmatrix}a_{21} & a_{22}\\ a_{31} & a_{33}\end{vmatrix}\\ &= a_{11}(a_{22}a_{33}-a_{23}a_{32}) - a_{12}(a_{21}a_{33}-a_{23}a_{31}) + a_{13}(a_{21}a_{33}-a_{22}a_{31})\end{aligned}$$

直接计算。这一方法称为行列式计算的对角线法。

定义 1.6.4 行列式不等于零的矩阵称为非奇异矩阵。

非奇异矩阵 $\boldsymbol{A}$ 存在逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$。

1. 关于行列式的等式关系 [290]

行列式服从以下等式关系。

(1) 如果矩阵的两行 (或列) 互换位置，则行列式保持不变。

(2) 若矩阵的某行 (或列) 是其他行 (或列) 的线性组合，则 $\det(\boldsymbol{A})=0$。特别地，若某行 (或列) 与另一行 (或列) 成正比或相等，或者某行 (或列) 的元素均等于零，则 $\det(\boldsymbol{A})=0$。

(3) 任何一个正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和它的转置矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 具有相同的行列式，即

$$\det(\boldsymbol{A}) = \det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) \tag{1.6.14}$$

但 $\det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) = [\det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})]^*$。

(4) 单位矩阵的行列式等于 1，即 $\det(\boldsymbol{I})=1$。

(5) 一个 Hermitian 矩阵的行列式为实数，因为

$$\det(\boldsymbol{A}) = \det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) = \det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) \Rightarrow \det(\boldsymbol{A}) = \det(\boldsymbol{A}^*) = [\det(\boldsymbol{A})]^* \tag{1.6.15}$$

(6) 两个矩阵乘积的行列式等于它们的行列式的乘积，即

$$\det(\boldsymbol{AB}) = \det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{B}), \qquad \boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in C^{n\times n} \tag{1.6.16}$$

(7) 对于一个三角 (上三角或下三角) 矩阵 $\boldsymbol{A}$，其行列式等于三角矩阵主对角线所有元素的乘积，即

$$\det(\boldsymbol{A}) = \prod_{i=1}^{n} a_{ii}$$

一个对角矩阵 $\boldsymbol{A}=\mathrm{diag}(a_{11},a_{22},\cdots,a_{nn})$ 的行列式也等于其对角元素的乘积。

(8) 给定一个任意的常数 (可以是复数) c，则

$$\det(c\boldsymbol{A}) = c^n\det(\boldsymbol{A}) \tag{1.6.17}$$

(9) 若 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则 $\det(\boldsymbol{A}^{-1}) = (\det(\boldsymbol{A}))^{-1}$。

(10) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times m}, \boldsymbol{B}_{m\times n}, \boldsymbol{C}_{n\times m}, \boldsymbol{D}_{n\times n}$，分块矩阵的行列式满足

$$\boldsymbol{A}\text{ 非奇异} \iff \det\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix} = \det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}) \tag{1.6.18}$$

或

$$\boldsymbol{D}\text{ 非奇异} \iff \det\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix} = \det(\boldsymbol{D})\det(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{C}) \tag{1.6.19}$$

下面给出式 (1.6.18) 的证明。若 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则容易验证分块矩阵

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}-\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{I} & \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}$$

注意到 $|\boldsymbol{M}\boldsymbol{L}| = |\boldsymbol{M}||\boldsymbol{L}|$ 和

$$\begin{vmatrix}\boldsymbol{R} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{X} & \boldsymbol{T}\end{vmatrix} = |\boldsymbol{R}||\boldsymbol{T}|, \qquad \begin{vmatrix}\boldsymbol{P} & \boldsymbol{Y}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{Q}\end{vmatrix} = |\boldsymbol{P}||\boldsymbol{Q}|$$

故有

$$\begin{aligned}\begin{vmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}\end{vmatrix} &= \begin{vmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}-\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\end{vmatrix}\begin{vmatrix}\boldsymbol{I} & \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}\end{vmatrix}\\ &= |\boldsymbol{A}||\boldsymbol{D}-\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}||\boldsymbol{I}||\boldsymbol{I}|\\ &= |\boldsymbol{A}||\boldsymbol{D}-\boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}|\end{aligned}$$

类似地，可以证明式 (1.6.19)。

2\. 关于行列式的不等式关系[290]

(1) Cauchy-Schwartz 不等式：若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 都是 $m\times n$ 矩阵，则

$$|\det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})|^2 \leqslant \det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})$$

(2) Hadamard 不等式：对于 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，有

$$\det(\boldsymbol{A}) \leqslant \prod_{i=1}^{m}\left(\sum_{j=1}^{m}|a_{ij}|^2\right)^{1/2}$$

(3) Fischer 不等式：若 $\boldsymbol{A}_{m\times m}, \boldsymbol{B}_{m\times n}, \boldsymbol{C}_{n\times n}$，则

$$\det\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{C}\end{bmatrix}\right) \leqslant \det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{C})$$

(4) Minkowski 不等式：若 $\boldsymbol{A}_{m\times m}\neq \boldsymbol{O}_{m\times m}$，$\boldsymbol{B}_{m\times m}\neq \boldsymbol{O}_{m\times m}$ 半正定，则

$$\sqrt[m]{\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})}\geqslant \sqrt[m]{\det(\boldsymbol{A})}+\sqrt[m]{\det(\boldsymbol{B})}$$

(5) 正定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式大于 0，即 $\det(\boldsymbol{A})>0$。

(6) 半正定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式大于或者等于 0，即 $\det(\boldsymbol{A})\geqslant 0$。

(7) 若 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 半正定，则

$$(\det(\boldsymbol{A}))^{1/m}\leqslant \frac{1}{m}\det(\boldsymbol{A})$$

(8) 若矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times m}$，$\boldsymbol{B}_{m\times m}$ 均半正定，则

$$\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant \det(\boldsymbol{A})+\det(\boldsymbol{B})$$

(9) 若 $\boldsymbol{A}_{m\times m}$ 正定，$\boldsymbol{B}_{m\times m}$ 半正定，则

$$\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant \det(\boldsymbol{A})$$

(10) 若 $\boldsymbol{A}_{m\times m}$ 正定，$\boldsymbol{B}_{m\times m}$ 半负定，则

$$\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\leqslant \det(\boldsymbol{A})$$

1.6.4 矩阵的秩

仅当 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 存在逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 时，矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 有解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$。逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 存在，仅当行列式 $|\boldsymbol{A}|\neq 0$。因此，在求矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ 时，需要事先确定行列式 $|\boldsymbol{A}|$ 是否等于零？一个 $n\times n$ 矩阵的行列式不等于零，当且仅当该矩阵的行或者列彼此线性无关。

上述讨论也可以推广到 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的情况：矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 是否有解，决定于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行或者列是否线性无关。此外，在讨论矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的一些重要性质时，线性无关的行和列也常常起着重要的作用。一个自然会问的问题是："一个给定的矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 究竟有多少个线性无关的行向量和列向量"？在回答这个问题之前，首先让我们来考虑一个与之有关的问题"一组 p 维向量中最多能够有几个线性无关的向量"？

定理 1.6.1 在 p 维 (行或列) 向量的集合之中，最多存在 p 个线性无关的 (行或列) 向量。

证明 [411, p.168] 令 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p$ 是 p 个线性无关的 p 维向量，并且 $\boldsymbol{u}_{p+1}$ 是另一个非零的 p 维向量。下面证明这一向量与 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p$ 线性相关。由于矩阵 $\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p]$ 具有线性无关的列，所以其行列式 $|\boldsymbol{U}|\neq 0$，即逆矩阵 $\boldsymbol{U}^{-1}$ 存在。令 $\boldsymbol{q}=-\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{u}_{p+1}$，则 $\boldsymbol{q}$ 不是零向量 (即其元素不可能全部为零)，因为 $\boldsymbol{u}_{p+1}$ 是非零向量。

另由 $\boldsymbol{q} = -\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{u}_{p+1}$ 有 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{q} + \boldsymbol{u}_{p+1} = \boldsymbol{0}$，即

$$q_1\boldsymbol{u}_1 + q_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + q_p\boldsymbol{u}_p + \boldsymbol{u}_{p+1} = \boldsymbol{0}$$

由于 $q_1, q_2, \cdots, q_p$ 不可能全部为零，上式意味着 $\boldsymbol{u}_{p+1}$ 是线性无关的向量组 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\}$ 的线性组合。即是说，当 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p$ 线性无关时，不可能存在另外一个向量，使得这 $p+1$ 个向量线性无关。 ■

有了上述定理，即可回答"矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 有多少个线性无关的行向量和列向量"这一重要问题。

定理 1.6.2 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的线性无关行数与线性无关列数相同。

证明 令 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 有 p 个线性无关的行和 q 个线性无关的列。下面证明 $p = q$。由于我们关心的只是线性无关的行数和线性无关的列数，故行互换和列互换这两种矩阵的初等变换对问题的讨论没有任何影响。于是，不失一般性，可以假定矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的前 p 行线性无关和前 q 列线性无关。即是说，矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 可以分块为

$$\boldsymbol{A}_{m\times n} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X}_{p\times q} & \boldsymbol{Y}_{p\times(n-q)} \\ \boldsymbol{Z}_{(m-p)\times q} & \boldsymbol{W}_{(m-p)\times(n-q)} \end{bmatrix} \leftarrow p \text{ 个线性无关行}$$

$\uparrow$

q 个线性无关的列

式中，分块矩阵 $\boldsymbol{X}_{p\times q}$ 有 p 个线性无关的行和 q 个线性无关的列。考察该分块矩阵的列分块形式 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_q]$，其中，$\boldsymbol{x}_i, i = 1, 2, \cdots, q$ 均为 p 维列向量。根据定理 1.6.1 知，在 p 维列向量的集合 $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_q\}$ 中，线性无关的列数最多等于 p，即有 $q \leqslant p$。类似地，分块矩阵 $\boldsymbol{X}_{p\times q}$ 的行分块为

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{a}_1 \\ \boldsymbol{a}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{a}_p \end{bmatrix}$$

式中，$\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_p$ 均为 $1\times q$ 行向量。根据定理 1.6.1，在这 p 个 q 维行向量的集合中，最多有 q 个线性无关的行向量，即 $p \leqslant q$。综合 $q \leqslant p$ 和 $p \leqslant q$ 立即有 $p = q$。 ■

从定理 1.6.2 出发，可以引出矩阵的秩的定义。

定义 1.6.5 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的秩定义为该矩阵中线性无关的行和列的数目。

需要指出，矩阵的秩只是强调该矩阵的线性无关的行数和线性无关的列数，并没有给出这些线性无关的行和列所在位置的任何信息。

根据秩的大小，矩阵方程 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} = \boldsymbol{b}_{m\times 1}$ 可分为以下三种类型：

(1) 适定方程：若 $m = n$，并且 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = n$，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则称矩阵方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 为适定 (well-determined) 方程。

(2) 欠定方程：若 $m < \text{rank}(\boldsymbol{A})$，即独立的方程个数小于独立的未知参数个数，则称矩阵方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 为欠定 (under-determined) 方程。

(3) 超定方程：若 $m > \text{rank}(\boldsymbol{A})$，即独立的方程个数大于独立的未知参数个数，则称矩阵方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 为超定 (over-determined) 方程。

下面是术语“适定”、“欠定”和“超定”的涵义。

适定的双层涵义：方程组的解是唯一的；独立的方程个数与独立未知参数的个数相同，正好可以唯一地确定该方程组的解。适定方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的唯一解由 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$ 给出。

欠定的涵义：独立的方程个数比独立的未知参数的个数少，意味着方程个数不足于确定方程组的唯一解。事实上，这样的方程组存在无穷多组解 $\boldsymbol{x}$。

超定的涵义：独立的方程个数超过独立的未知参数的个数，对于确定方程组的唯一解显得方程过剩。因此，超定方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 没有使得方程组严格满足的精确解 $\boldsymbol{x}$。

根据定义 1.6.5，秩 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = r_A$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 r_A 个线性无关的列向量。这 r_A 个线性无关的列向量的所有线性组合，便形成了一个向量空间，称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间、$\boldsymbol{A}$ 的值域 (range) 或 $\boldsymbol{A}$ 的流形，常记为 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$。列空间 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 具有维数 r_A。因此，矩阵的秩也可以利用矩阵的列空间的维数定义。

定义 1.6.6 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的列空间 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 的维数定义为该矩阵的秩，即有

$$r_A = \dim[\mathcal{R}(\boldsymbol{A})] \tag{1.6.20}$$

根据定义 1.6.6 知，若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 r_A，则该矩阵的列空间 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 是一个 r_A 维子空间。

关于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩的下列叙述等价，每一叙述在不同的场合有用。

(1) $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = k$;

(2) 存在 $\boldsymbol{A}$ 的 k 列且不多于 k 列组成一线性无关组；

(3) 存在 $\boldsymbol{A}$ 的 k 行且不多于 k 行组成一线性无关组；

(4) 存在 $\boldsymbol{A}$ 的一个 $k\times k$ 子矩阵具有非零行列式，而且 $\boldsymbol{A}$ 的所有 $(k+1)\times(k+1)$ 子矩阵都具有零行列式；

(5) 列空间 $\mathcal{R}(\boldsymbol{A})$ 的维数等于 k;

(6) $k = n - \dim[\text{Null}(\boldsymbol{A})]$，其中，$\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的零空间。

下面讨论矩阵的秩的性质。由于这些性质与两个矩阵乘积的秩密切相关，有必要先讨论乘积矩阵的秩。

定理 1.6.3 令 $r_A = \text{rank}(\boldsymbol{A})$ 和 $r_B = \text{rank}(\boldsymbol{B})$，则乘积矩阵 $\boldsymbol{AB}$ 的秩 $r_{AB} = \text{rank}(\boldsymbol{AB})$ 满足不等式

$$r_{AB} \leqslant \min\{r_A, r_B\} \tag{1.6.21}$$

证明　令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别是 $p\times q$ 和 $q\times n$ 矩阵。不妨令 $r_A\leqslant r_B$，这意味着 $r_A\leqslant\min\{q,n\}$。对于矩阵 $\boldsymbol{A}$，假定 $p\times p$ 矩阵 $\boldsymbol{P}$ 和 $q\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 分别是对 $\boldsymbol{A}$ 的列和行进行初等变换的非奇异矩阵，并使得

$$\boldsymbol{PAQ}=\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{r_A} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\quad\text{或}\quad \boldsymbol{PA}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{r_A} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{Q}^{-1}$$

用 $\boldsymbol{B}$ 右乘第二式两边，由于 $r_A\leqslant\min\{q,n\}$，故 $q\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{B}$ 可分块为 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{T}_{r_A\times n}\\ \boldsymbol{S}_{(q-r_A)\times n}\end{bmatrix}$，使得

$$\boldsymbol{PAB}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{r_A} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{r_A} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{T}_{r_A\times n}\\ \boldsymbol{S}_{(q-r_A)\times n}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{T}_{r_A\times n}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$$

由于 $\boldsymbol{P}$ 是一系列初等变换的乘积，它不会改变矩阵 $\boldsymbol{AB}$ 的秩，故

$$\text{rank}(\boldsymbol{PAB})=\text{rank}(\boldsymbol{AB})=\text{rank}\begin{bmatrix}\boldsymbol{T}_{r_A\times n}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\leqslant r_A$$

由于假定 $r_A\leqslant r_B$，所以上式意味着 $\text{rank}(\boldsymbol{AB})\leqslant\min\{r_A,r_B\}$。

类似地，令 $r_A\geqslant r_B$，这意味着 $r_B\leqslant p$ 或 $r_B\leqslant q$。假定存在 $q\times q$ 初等变换矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和 $n\times n$ 初等变换矩阵 $\boldsymbol{V}$ 使得

$$\boldsymbol{UBV}=\boldsymbol{D}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{r_B} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\quad\text{或}\quad \boldsymbol{BV}=\boldsymbol{U}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{r_B} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$$

用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 左乘第二式两边，则 $p\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{AU}^{-1}$ 可以分块为 $[\boldsymbol{T}_{p\times r_B},\boldsymbol{S}_{p\times(q-r_B)}]$，使得

$$\boldsymbol{ABV}=\boldsymbol{AU}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{r_B} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=[\boldsymbol{T}_{p\times r_B},\boldsymbol{S}_{p\times(q-r_B)}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{r_B} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=[\boldsymbol{T}_{p\times r_B},\boldsymbol{O}]$$

由于 $\boldsymbol{V}$ 是一系列初等变换矩阵的乘积，它不改变矩阵 $\boldsymbol{AB}$ 的秩，故

$$\text{rank}(\boldsymbol{ABV})\leqslant\text{rank}(\boldsymbol{AB})=\text{rank}[\boldsymbol{T}_{p\times r_B},\boldsymbol{O}]\leqslant r_B$$

由于假定 $r_A\geqslant r_B$，所以上式意味着 $\text{rank}(\boldsymbol{AB})\leqslant\min\{r_A,r_B\}$。这就证明了本定理。 ■

引理 1.6.2　$m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 左乘 $m\times m$ 非奇异矩阵 $\boldsymbol{P}$ 或者右乘 $n\times n$ 非奇异矩阵 $\boldsymbol{Q}$，将不改变 $\boldsymbol{A}$ 的秩。

证明　由于 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{P}$ 非奇异，即 $\text{rank}(\boldsymbol{P})=m$，故 $\text{rank}(\boldsymbol{A})\leqslant\text{rank}(\boldsymbol{P})$。令 $\boldsymbol{M}=\boldsymbol{PA}$，则根据定理 1.6.3 知 $\text{rank}(\boldsymbol{M})\leqslant\text{rank}(\boldsymbol{A})$。另一方面，由 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{M}$ 及定理 1.6.3 又有 $\text{rank}(\boldsymbol{A})\leqslant\text{rank}(\boldsymbol{M})$。于是，$\text{rank}(\boldsymbol{A})=\text{rank}(\boldsymbol{M})=\text{rank}(\boldsymbol{PA})$。类似地，可以证明 $\text{rank}(\boldsymbol{A})=\text{rank}(\boldsymbol{AQ})$。 ■

特别地，若 $p\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{P}$ 具有满列秩，$n\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 具有满行秩，即 $\text{rank}(\boldsymbol{P})=m$ 和 $\text{rank}(\boldsymbol{Q})=n$，则 $\text{rank}(\boldsymbol{PA})=\text{rank}(\boldsymbol{A})$ 和 $\text{rank}(\boldsymbol{AQ})=\text{rank}(\boldsymbol{A})$。

引理 1.6.3　$\text{rank}[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]\leqslant\text{rank}(\boldsymbol{A})+\text{rank}(\boldsymbol{B})$。

证明

$$\begin{aligned}\text{rank}[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] &\leqslant \text{矩阵 } [\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] \text{ 的线性无关列数}\\ &\leqslant \text{矩阵 } \boldsymbol{A} \text{ 的线性无关列数} + \text{矩阵 } \boldsymbol{B} \text{ 的线性无关列数}\\ &\leqslant \text{rank}(\boldsymbol{A}) + \text{rank}(\boldsymbol{B})\end{aligned}$$

即引理得证。 ■

引理 1.6.4 $\text{rank}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \text{rank}[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}] \leqslant \text{rank}(\boldsymbol{A}) + \text{rank}(\boldsymbol{B})$。

证明 对矩阵 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B} = [\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}\\ \boldsymbol{I}\end{bmatrix}$ 应用定理 1.6.3，则有 $\text{rank}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \text{rank}[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]$。将这一结果与引理 1.6.3 综合在一起，立即得到引理 1.6.4。 ■

引理 1.6.5 对于 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $n\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$，秩不等式 $\text{rank}(\boldsymbol{AB}) \geqslant \text{rank}(\boldsymbol{A}) + \text{rank}(\boldsymbol{B}) - n$ 成立。

证明 令 $r_A = \text{rank}(\boldsymbol{A})$，且 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{P}$ 和 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 是适当的初等变换矩阵，使得 $\boldsymbol{PAQ} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{r_A} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$。定义 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{P}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{n-r_A}\end{bmatrix}\boldsymbol{Q}^{-1}$，则 $\text{rank}(\boldsymbol{X}) = n - r_A$ 和 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{X} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q}^{-1}$。于是，根据引理 1.6.2 得

$$\begin{aligned}\text{rank}(\boldsymbol{B}) = \text{rank}(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{B}) &= \text{rank}(\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{XB})\\ &\leqslant \text{rank}(\boldsymbol{AB}) + \text{rank}(\boldsymbol{XB}) \quad (\text{引理}1.6.4)\\ &\leqslant \text{rank}(\boldsymbol{AB}) + \text{rank}(\boldsymbol{X}) \quad (\text{因为 } \text{rank}(\boldsymbol{XB}) \leqslant \text{rank}(\boldsymbol{X}))\\ &\leqslant \text{rank}(\boldsymbol{AB}) + n - r_A\end{aligned}$$

即有 $\text{rank}(\boldsymbol{AB}) \geqslant \text{rank}(\boldsymbol{A}) + \text{rank}(\boldsymbol{B}) - n$。 ■

矩阵的秩具有以下性质、等式关系和不等式关系。

1. 秩的性质

(1) 秩是一个正整数。

(2) 秩等于或小于矩阵的行数或列数。

(3) 当 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩等于 n 时，则 $\boldsymbol{A}$ 是非奇异矩阵，或称 $\boldsymbol{A}$ 满秩 (full rank)。

(4) 如果 $\text{rank}(\boldsymbol{A}_{m\times n}) < \min\{m,n\}$，则称 $\boldsymbol{A}$ 是秩亏缺的 (rank deficient)。一个秩亏缺的正方矩阵称为奇异矩阵。

(5) 若 $\text{rank}(\boldsymbol{A}_{m\times n}) = m\,(< n)$，则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有满行秩 (full row rank)。

(6) 若 $\text{rank}(\boldsymbol{A}_{m\times n}) = n\,(< m)$，则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有满列秩 (full column rank)。

(7) 任何矩阵 $\boldsymbol{A}$ 左乘满列秩矩阵或者右乘满行秩矩阵后，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩保持不变。

(8) 当矩阵的秩 $\text{rank}(\boldsymbol{A}_{m\times n}) = r \neq 0$ 时，至少存在一个 $r\times r$ 子矩阵 $\boldsymbol{X}_{r\times r}$ 满秩或非奇异。即是说，矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 可以分块为

$$\boldsymbol{A}_{m\times n} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_{r\times r} & \boldsymbol{Y}_{r\times(n-r)}\\ \boldsymbol{Z}_{(m-r)\times r} & \boldsymbol{W}_{(m-r)\times(n-r)}\end{bmatrix}$$

式中，$\boldsymbol{X}_{r\times r}$ 非奇异。

2. 关于秩的等式

(1) 若 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}$，则 $\text{rank}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}) = \text{rank}(\boldsymbol{A}^{\text{T}}) = \text{rank}(\boldsymbol{A}^{*}) = \text{rank}(\boldsymbol{A})$。

(2) 若 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}$ 和 $c \neq 0$，则 $\text{rank}(c\boldsymbol{A}) = \text{rank}(\boldsymbol{A})$。

(3) 若 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times m}$ 和 $\boldsymbol{C} \in C^{n\times n}$ 均非奇异，则对于任一矩阵 $\boldsymbol{B} \in C^{m\times n}$ 有 $\text{rank}(\boldsymbol{AB}) = \text{rank}(\boldsymbol{B}) = \text{rank}(\boldsymbol{BC}) = \text{rank}(\boldsymbol{ABC})$。即是说，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 左乘与 (或) 右乘一个非奇异矩阵后，$\boldsymbol{B}$ 的秩保持不变。

(4) 如果 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in C^{m\times n}$，则 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = \text{rank}(\boldsymbol{B})$ 当且仅当存在非奇异矩阵 $\boldsymbol{X} \in C^{m\times m}$ 和 $\boldsymbol{Y} \in C^{n\times n}$ 使得 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{XAY}$。

(5) 若 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}$，则

$$\text{rank}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\text{T}}) = \text{rank}(\boldsymbol{A}^{\text{T}}\boldsymbol{A}) = \text{rank}(\boldsymbol{A})$$

$$\text{rank}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\text{H}}) = \text{rank}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A}) = \text{rank}(\boldsymbol{A})$$

(6) 若 $\boldsymbol{A} \subset C^{m\times m}$，则

$$\text{rank}(\boldsymbol{A}) = m \iff \det(\boldsymbol{A}) \neq 0 \iff \boldsymbol{A}\ \text{非奇异}$$

(7) 若 $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，且 $\boldsymbol{B} \in C^{m\times n}, \boldsymbol{C} \in C^{n\times m}, \boldsymbol{D} \in C^{n\times n}$，则

$$\text{rank}\begin{bmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D} \end{bmatrix} = m \iff \boldsymbol{D} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}$$

3. 关于秩的不等式

(1) 对于任意 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 均有 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) \leqslant \min\{m, n\}$。

(2) 若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in C^{m\times n}$，则 $\text{rank}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}) \leqslant \text{rank}(\boldsymbol{A}) + \text{rank}(\boldsymbol{B})$。

(3) 若 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times k}$ 和 $\boldsymbol{B} \in C^{k\times n}$，则

$$\text{rank}(\boldsymbol{A}) + \text{rank}(\boldsymbol{B}) - k \leqslant \text{rank}(\boldsymbol{AB}) \leqslant \min\{\text{rank}(\boldsymbol{A}), \text{rank}(\boldsymbol{B})\}$$

(4) 如果从任意矩阵中删去某些行与 (或) 某些列，则所得子矩阵的秩不可能大于原矩阵的秩。

1.7 逆 矩 阵

除了 1.1 节介绍的矩阵基本运算外，矩阵的求逆也是一种经常遇到的重要运算。特别地，矩阵求逆引理在信号处理、系统科学、神经网络、自动控制等学科中经常用到。

1.7.1 逆矩阵的定义与性质

一个 $n \times n$ 矩阵称为非奇异矩阵，若它具有 n 个线性无关的列向量和 n 个线性无关

的行向量。非奇异矩阵也可以从线性系统的观点出发定义：一线性变换或正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为非奇异的，若它只对零输入产生零输出。否则，它是奇异的。如果一个矩阵非奇异，那么它必定存在逆矩阵。反之，一奇异矩阵肯定不存在逆矩阵。一个 $n \times n$ 的正方矩阵 $\boldsymbol{B}$ 满足 $\boldsymbol{BA} = \boldsymbol{AB} = \boldsymbol{I}$ 时，就称矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵，记为 $\boldsymbol{A}^{-1}$。

一个 $n \times n$ 矩阵的非奇异性的另外一种常用表示形式为行列式。下面从行列式入手，对矩阵的逆矩阵展开讨论。

若一个正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有元素 a_{ij} 分别由它们的余子式 A_{ij} 代替，然后转置，所得到的矩阵称为 $\boldsymbol{A}$ 的伴随矩阵 (adjoint matrix)，记作 $\text{adj}(\boldsymbol{A})$，即有

$$\text{adj}(\boldsymbol{A}) = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix} \tag{1.7.1}$$

若行列式 $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 存在，并且唯一。逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 由下式给出：

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{\det(\boldsymbol{A})}\text{adj}(\boldsymbol{A}) = \frac{1}{|\boldsymbol{A}|}\begin{bmatrix} A_{11} & A_{21} & \cdots & A_{n1} \\ A_{12} & A_{22} & \cdots & A_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{1n} & A_{2n} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix} \tag{1.7.2}$$

例 1.7.1 对于矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 5 \\ 4 & 6 \end{bmatrix}$$

易知

$$\begin{aligned} |\boldsymbol{A}| &= (6 - 20) = -14 \\ \text{adj}(\boldsymbol{A}) &= \begin{bmatrix} 6 & -4 \\ -5 & 1 \end{bmatrix}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 6 & -5 \\ -4 & 1 \end{bmatrix} \\ \boldsymbol{A}^{-1} &= \frac{1}{|\boldsymbol{A}|}\text{adj}\,(\boldsymbol{A}) = \frac{1}{-14}\begin{bmatrix} 6 & -5 \\ -4 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{3}{7} & \frac{5}{14} \\ \frac{2}{7} & -\frac{1}{14} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

伴随矩阵具有下面的性质。

命题 1.7.1 矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 的伴随矩阵 $\text{adj}(\boldsymbol{A})$ 的转置等于 $\boldsymbol{A}$ 的转置的伴随矩阵，即有 $[\text{adj}(\boldsymbol{A})]^{\mathrm{T}} = \text{adj}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$。

证明 根据伴随矩阵的定义知

$$[\text{adj}(\boldsymbol{A})]^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix}$$

又因为

$$\operatorname{adj}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) = \operatorname{adj}\left(\begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{n1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdots & a_{n2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdots & A_{1n} \\ A_{21} & A_{22} & \cdots & A_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ A_{n1} & A_{n2} & \cdots & A_{nn} \end{bmatrix}$$

比较以上两式，立即有 $[\operatorname{adj}(\boldsymbol{A})]^{\mathrm{T}} = \operatorname{adj}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$。 ■

若矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{n\times n}$ 的逆矩阵存在，则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是非奇异的或可逆的。关于矩阵的非奇异性或可逆性，下列叙述等价 [224]：

(1) $\boldsymbol{A}$ 非奇异；

(2) $\boldsymbol{A}^{-1}$ 存在；

(3) $\operatorname{rank}(\boldsymbol{A}) = n$；

(4) $\boldsymbol{A}$ 的行线性无关；

(5) $\boldsymbol{A}$ 的列线性无关；

(6) $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$；

(7) $\boldsymbol{A}$ 的值域的维数是 n；

(8) $\boldsymbol{A}$ 的零空间的维数是 0；

(9) $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 对每一个 $\boldsymbol{b} \in C^n$ 都是一致方程；

(10) $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 对每一个 $\boldsymbol{b}$ 有唯一的解；

(11) $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ 只有平凡解 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$。

下面是一个 $n \times n$ 维的典型非奇异矩阵及其逆矩阵：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \frac{n+2}{2n+2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{2n+2} \\ -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & \cdots & \cdots & \cdots & -\frac{1}{2} & 1 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2n+2} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & -\frac{1}{2} & \frac{n+2}{2n+2} \end{bmatrix} \tag{1.7.3}$$

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{bmatrix} n & n-1 & \cdots & 2 & 1 \\ n-1 & n & \cdots & 3 & 2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 2 & 3 & \cdots & n & n-1 \\ 1 & 2 & \cdots & n-1 & n \end{bmatrix} \tag{1.7.4}$$

它们可以用来检验大矩阵求逆的计算机程序的性能 [517]。

$n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 具有以下性质 [29],[224]：

(1) $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{I}$。

(2) $\boldsymbol{A}^{-1}$ 是唯一的。

(3) 逆矩阵的行列式等于原矩阵行列式的倒数，即 $|\boldsymbol{A}^{-1}| = \dfrac{1}{|\boldsymbol{A}|}$。

(4) 逆矩阵是非奇异的。

(5) $(\boldsymbol{A}^{-1})^{-1} = \boldsymbol{A}$。

(6) 复共轭转置矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的逆矩阵等于逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的复共轭转置，即 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1} = (\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}$。逆矩阵的复共轭转置常采用符号 $\boldsymbol{A}^{-\mathrm{H}} = (\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}$ 简记之。

(7) 若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}$, 则 $(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}^{-1}$。

(8) $(\boldsymbol{A}^*)^{-1} = (\boldsymbol{A}^{-1})^*$。

(9) 如果 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都是可逆的，则

$$(\boldsymbol{AB})^{-1} = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7.5}$$

更一般地，有

$$(\boldsymbol{ABC})^{-1} = \boldsymbol{C}^{-1}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7.6}$$

(10) 若 $\boldsymbol{A} = \mathrm{diag}(a_1, a_2, \cdots, a_m)$ 为对角矩阵，则其逆矩阵

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \mathrm{diag}(a_1^{-1}, a_2^{-1}, \cdots, a_m^{-1})$$

(11) 若 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则

$$\boldsymbol{A}\text{ 为正交矩阵} \iff \boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{A}\text{ 为酉矩阵} \iff \boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$$

下面证明性质 (1)~ 性质 (7) 和性质 (9)，其他性质的证明留给读者做练习。

证明 性质 (1) 的证明：假定 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$，并且存在另外一个矩阵 $\boldsymbol{P}$ 满足 $\boldsymbol{AP} = \boldsymbol{I}$。于是，左乘逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 后，得 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{AP} = \boldsymbol{A}^{-1}$。但由于 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$，故有 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{A}^{-1}$。因此，有 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{I}$。

性质 (2) 的证明：令 $\boldsymbol{P}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的另一个逆矩阵。在 (1) 的证明中，已经证明满足 $\boldsymbol{AP} = \boldsymbol{I}$ 的矩阵 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{A}^{-1}$。下面证明满足 $\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{I}$ 的矩阵为 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{A}^{-1}$。在 $\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{I}$ 两边右乘 $\boldsymbol{A}^{-1}$，得 $\boldsymbol{PAA}^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1}$。由于 $\boldsymbol{AA}^{-1} = \boldsymbol{I}$，故立即有 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{A}^{-1}$。因此，同时满足 $\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{AP} = \boldsymbol{I}$ 的矩阵 $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{A}^{-1}$，即 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 是唯一的。

性质 (3) 的证明：由于 $|\boldsymbol{AB}| = |\boldsymbol{A}||\boldsymbol{B}|$，故 $|\boldsymbol{A}||\boldsymbol{A}^{-1}| = |\boldsymbol{AA}^{-1}| = |\boldsymbol{I}| = 1$，即有 $|\boldsymbol{A}^{-1}| = \dfrac{1}{|\boldsymbol{A}|}$。

性质 (4) 的证明：矩阵 $\boldsymbol{A}$ 存在逆矩阵时，其行列式 $|\boldsymbol{A}| \neq 0$，故 $|\boldsymbol{A}^{-1}| = \dfrac{1}{|\boldsymbol{A}|} \neq 0$。这表明，逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 是非奇异的。

性质 (5) 的证明：在 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$ 两边左乘 $(\boldsymbol{A}^{-1})^{-1}$，并利用 $(\boldsymbol{A}^{-1})^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{I}$，即得 $\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{A}^{-1})^{-1}$。

性质 (6) 的证明：对 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$ 进行复共轭转置，得 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{I}$。这表明，$(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的逆矩阵，即有 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1}=(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}$。

性质 (7) 的证明：若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$，则 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1}=(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}$ 等价为 $\boldsymbol{A}^{-1}=(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{H}}$。

性质 (9) 的证明：假定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个可逆的正方矩阵。易知

$$\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}\quad 和 \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{I}$$

因此，$\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}$ 的逆矩阵，即 $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B})^{-1}=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}$。 ■

1.7.2 矩阵求逆引理

引理 1.7.1 (Sherman-Morrison 公式) 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 的可逆矩阵，并且 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 是两个 $n\times 1$ 向量，使得 $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})$ 可逆，则

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}-\frac{\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}}{1+\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}} \tag{1.7.7}$$

证明 由于

$$\boldsymbol{A}+\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})$$

故有

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})^{-1}=(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7.8}$$

若 $(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B})$ 可逆，并且 $\boldsymbol{B}\neq\boldsymbol{I}$，则 $(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B})^{-1}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^2-\boldsymbol{B}^3+\cdots$。将这一公式代入式 (1.7.8) 中的 $(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})^{-1}$，立即有

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})^{-1}&=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}+(\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})^2-(\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})^3+\cdots\\&=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}-\cdots\end{aligned} \tag{1.7.9}$$

将式 (1.7.9) 代入式 (1.7.8)，易知

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})^{-1}&=\boldsymbol{A}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}(\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x})\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}-\cdots\\&=\boldsymbol{A}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}[1-(\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x})+(\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x})^2-\cdots]\end{aligned}$$

由矩阵 $(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}})$ 的可逆性知，标量 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}\neq -1$，从而有

$$1-(\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x})+(\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x})^2-\cdots=\frac{1}{1+\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}}$$

综合以上两式，立即得式 (1.7.7)。 ■

引理 1.7.1 称为矩阵求逆引理，是 Sherman 与 Morrison [414],[415] 于 1949 年和 1950 年得到的。

矩阵求逆引理可以推广为矩阵之和的求逆公式：

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V})^{-1}&=\boldsymbol{A}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\\&=\boldsymbol{A}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\end{aligned} \tag{1.7.10}$$

或者

$$(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{U}\boldsymbol{V})^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7.11}$$

这一公式是 Woodbury 于 1950 年得到的 [481]，也称 Woodbury 公式。矩阵 $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}$ 有时称为容量矩阵 (capacitance matrix)。

当 $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{u}$、$\boldsymbol{B}=b$ 和 $\boldsymbol{V}=\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}$ 时，Woodbury 公式给出结果

$$(\boldsymbol{A}+b\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}})^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}-\frac{b}{1+b\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{u}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7.12}$$

特别地，若 $b=1$，则式 (1.7.12) 简化为 Sherman 与 Morrison 的矩阵求逆引理公式 (1.7.7)。

事实上，在 Woodbury 得到求逆公式 (1.7.10) 之前，Duncan [139] 和 Guttman [196] 就已经分别于 1944 年和 1946 年得到了下面的求逆公式：

$$(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7.13}$$

这一公式也被称为 Duncan-Guttman 求逆公式 [365],[366]。

除了 Woodbury 公式之外，矩阵之和的逆矩阵还有下面的形式 [213]：

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V})^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1})^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7.14}$$

$$=\boldsymbol{A}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7.15}$$

$$=\boldsymbol{A}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V})^{-1}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{1.7.16}$$

$$=\boldsymbol{A}^{-1}-\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1})^{-1} \tag{1.7.17}$$

下面是分块矩阵的几种求逆公式。

(1) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆时，为 [25]

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{U}\\ \boldsymbol{V} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}^{-1}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1} & -\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\\ -(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1} & (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\end{bmatrix} \tag{1.7.18}$$

(2) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 可逆时，为 [227],[228]

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{U}\\ \boldsymbol{V} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1} & -\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\\ -\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{V}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1} & (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\end{bmatrix} \tag{1.7.19}$$

(3) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 可逆时，为 [139]

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{U}\\ \boldsymbol{V} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1} & -(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{-1}\\ -(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1} & (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\end{bmatrix} \tag{1.7.20}$$

或者 [11, pp.138~139]

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{U}\\ \boldsymbol{V} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1} & -(\boldsymbol{V}-\boldsymbol{D}\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A})^{-1}\\ (\boldsymbol{U}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}^{-1}\boldsymbol{D})^{-1} & (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\end{bmatrix} \tag{1.7.21}$$

利用逆矩阵的定义，不难分别验证增广矩阵求逆和分块矩阵求逆的正确性，留给读者作练习。矩阵求逆在信号处理、神经网络、自动控制和系统理论等中具有广泛的应用。

特别地，在自适应信号处理和控制中，基于矩阵求逆引理的递推最小二乘 (RLS) 算法是一种有效的方法，而分块矩阵的求逆在推导斜投影矩阵的公式中起着重要的作用，详见第 10 章 (投影分析)。

下面介绍 Woodbury 公式的两个典型应用。

令 $\boldsymbol{J}_n$ 是一个 $n \times n$ 矩阵，其元素全部为 1，则由于 $n \times n$ 矩阵 (其中，$a \neq b$)

$$\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} a & b & \cdots & b \\ b & a & \cdots & b \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ b & b & \cdots & a \end{bmatrix} = [(a-b)\boldsymbol{I}_n + b\boldsymbol{J}_n] = (a-b)\left(\boldsymbol{I}_n + \frac{b}{a-b}\boldsymbol{J}_n\right) \tag{1.7.22}$$

故由 Woodbury 公式 (1.7.10)，可求得逆矩阵

$$\boldsymbol{V}^{-1} = \frac{1}{a-b}\left(\boldsymbol{I}_n + \frac{b}{a-b}\boldsymbol{J}_n\right)^{-1} = \frac{1}{a-b}\left[\boldsymbol{I}_n - \frac{b}{a+(n-1)b}\boldsymbol{J}_n\right] \tag{1.7.23}$$

假定 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{U}, \boldsymbol{V}$ 均为 $n \times n$ 矩阵，则利用 Woodbury 公式 (1.7.11)，可以得到求解矩阵方程 $(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{U}\boldsymbol{V})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的方法如下 [197]：

(1) 求解矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{b}$ 得到 $\boldsymbol{y}$。

(2) 通过求解矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_i = \boldsymbol{u}_i$ 得到 $\boldsymbol{w}_i$，然后构造矩阵 $\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \cdots, \boldsymbol{w}_n]$，此即 $\boldsymbol{W} = \boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}$ 的结果。

(3) 构造矩阵 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{V}\boldsymbol{W}$ 和向量 $\boldsymbol{V}\boldsymbol{y}$，并求解线性方程 $\boldsymbol{C}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{y}$，得到 $\boldsymbol{z}$。

(4) 矩阵方程 $(\boldsymbol{A} - \boldsymbol{U}\boldsymbol{V})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的解由 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y} + \boldsymbol{W}\boldsymbol{z}$ 给出。

顺便指出，上述方法的所有四个步骤都只需要矩阵的初等变换和基本运算，并不需要直接计算逆矩阵。

最后介绍 Hermitian 矩阵的求逆引理。令 Hermitian 矩阵的分块形式为

$$\boldsymbol{R}_{m+1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_m & \boldsymbol{r}_m \\ \boldsymbol{r}_m^{\mathrm{H}} & \rho_m \end{bmatrix} \tag{1.7.24}$$

下面考虑使用 $\boldsymbol{R}_m^{-1}$ 递推 $\boldsymbol{R}_{m+1}^{-1}$。为此，令

$$\boldsymbol{Q}_{m+1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}_m & \boldsymbol{q}_m \\ \boldsymbol{q}_m^{\mathrm{H}} & \alpha_m \end{bmatrix} \tag{1.7.25}$$

于是

$$\boldsymbol{R}_{m+1}\boldsymbol{Q}_{m+1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_m & \boldsymbol{r}_m \\ \boldsymbol{r}_m^{\mathrm{H}} & \rho_m \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}_m & \boldsymbol{q}_m \\ \boldsymbol{q}_m^{\mathrm{H}} & \alpha_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_m & \boldsymbol{0}_m \\ \boldsymbol{0}_m^{\mathrm{H}} & 1 \end{bmatrix} \tag{1.7.26}$$

由此可以导出下面四个方程式：

$$\boldsymbol{R}_m\boldsymbol{Q}_m + \boldsymbol{r}_m\boldsymbol{q}_m^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_m \tag{1.7.27}$$

$$\boldsymbol{r}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}_m + \rho_m\boldsymbol{q}_m^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{0}_m^{\mathrm{H}} \tag{1.7.28}$$

$$\boldsymbol{R}_m\boldsymbol{q}_m + \boldsymbol{r}_m\alpha_m = \boldsymbol{0}_m \tag{1.7.29}$$

$$\boldsymbol{r}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{q}_m + \rho_m\alpha_m = 1 \tag{1.7.30}$$

若 $\boldsymbol{R}_m$ 可逆，则由式 (1.7.29) 有

$$\boldsymbol{q}_m = -\alpha_m \boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m \tag{1.7.31}$$

此结果代入式 (1.7.30) 后，即有

$$\alpha_m = \frac{1}{\rho_m - \boldsymbol{r}_m^{\mathrm{H}} \boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m} \tag{1.7.32}$$

将式 (1.7.32) 代入式 (1.7.31)，又可以求得

$$\boldsymbol{q}_m = \frac{-\boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m}{\rho_m - \boldsymbol{r}_b^{\mathrm{H}} \boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m} \tag{1.7.33}$$

若将式 (1.7.33) 代入式 (1.7.27)，则

$$\boldsymbol{Q}_m = \boldsymbol{R}_m^{-1} - \boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m \boldsymbol{q}_m^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{R}_m^{-1} + \frac{\boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m (\boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m)^{\mathrm{H}}}{\rho_m - \boldsymbol{r}_m^{\mathrm{H}} \boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m} \tag{1.7.34}$$

为了简化式 (1.7.32) ~ 式 (1.7.34)，不妨令

$$\boldsymbol{b}_m \stackrel{\mathrm{def}}{=} [b_0^{(m)}, b_1^{(m)}, \cdots, b_{m-1}^{(m)}]^{\mathrm{T}} = -\boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m \tag{1.7.35}$$

$$\beta_m \stackrel{\mathrm{def}}{=} \rho_m - \boldsymbol{r}_m^{\mathrm{H}} \boldsymbol{R}_m^{-1} \boldsymbol{r}_m = \rho_m + \boldsymbol{r}_m^{\mathrm{H}} \boldsymbol{b}_m \tag{1.7.36}$$

这样一来，式 (1.7.32) ~ 式 (1.7.34) 即可依次简化为

$$\alpha_m = \frac{1}{\beta_m}$$

$$\boldsymbol{q}_m = \frac{1}{\beta_m} \boldsymbol{b}_m$$

$$\boldsymbol{Q}_m = \boldsymbol{R}_m^{-1} + \frac{1}{\beta_m} \boldsymbol{b}_m \boldsymbol{b}_m^{\mathrm{H}}$$

将它们代入式 (1.7.26)，即得

$$\boldsymbol{R}_{m+1}^{-1} = \boldsymbol{Q}_{m+1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_m^{-1} & \boldsymbol{0}_m \\ \boldsymbol{0}_m^{\mathrm{H}} & 0 \end{bmatrix} + \frac{1}{\beta_m} \begin{bmatrix} \boldsymbol{b}_m \boldsymbol{b}_m^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{b}_m \\ \boldsymbol{b}_m^{\mathrm{H}} & 1 \end{bmatrix} \tag{1.7.37}$$

这一由 $\boldsymbol{R}_m^{-1}$ 求 $\boldsymbol{R}_{m+1}^{-1}$ 的秩 1 修正公式称为 Hermitian 矩阵的分块求逆引理 [336]。

1.8 广义逆矩阵

前节讨论了正方矩阵的逆矩阵。将正方矩阵的逆矩阵推广到长方形矩阵或奇异的正方矩阵，将得到所谓的广义逆矩阵。广义逆矩阵的一大应用就是利用它对线性最小二乘方法可作出统一的理论解释。

1.8.1 左逆矩阵与右逆矩阵

从广义的角度讲，任何一个矩阵 $\boldsymbol{L}$ 都可以称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵，若它与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的乘积等于单位矩阵 $\boldsymbol{I}$，即 $\boldsymbol{LA}=\boldsymbol{I}$。根据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 本身的特点，满足这一定义的矩阵 $\boldsymbol{L}$ 存在三种可能的答案：

(1) 在某些情况下，$\boldsymbol{L}$ 存在，并且唯一；

(2) 在另一些情况下，$\boldsymbol{L}$ 存在，但不唯一；

(3) 在某些情况下，$\boldsymbol{L}$ 不存在。

例 1.8.1 考虑以下三个矩阵

$$\boldsymbol{A}_1=\begin{bmatrix}2 & -2 & -1\\ 1 & 1 & -2\\ 1 & 0 & -1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{A}_2=\begin{bmatrix}4 & 8\\ 5 & -7\\ -2 & 3\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{A}_3=\begin{bmatrix}1 & 3 & 1\\ 2 & 5 & 1\end{bmatrix}$$

对矩阵 $\boldsymbol{A}_1$，存在唯一矩阵

$$\boldsymbol{L}_1=\begin{bmatrix}-1 & -2 & 5\\ -1 & -1 & 3\\ -1 & -2 & 4\end{bmatrix}$$

不仅使得 $\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{I}_3$，而且使得 $\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{L}_1=\boldsymbol{I}_3$。此时，矩阵 $\boldsymbol{L}_1$ 实际就是矩阵 $\boldsymbol{A}_1$ 的逆矩阵，即 $\boldsymbol{L}_1=\boldsymbol{A}_1^{-1}$。

在矩阵 $\boldsymbol{A}_2$ 的情况下，存在多个矩阵使得 $\boldsymbol{L}_2\boldsymbol{A}_2=\boldsymbol{I}_2$，如

$$\boldsymbol{L}_2=\begin{bmatrix}\frac{7}{68} & \frac{2}{17} & 0\\ 0 & 2 & 5\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{L}_2=\begin{bmatrix}0 & 3 & 7\\ 0 & 2 & 5\end{bmatrix},\ \cdots$$

对矩阵 $\boldsymbol{A}_3$，没有任何 3×2 矩阵使得 $\boldsymbol{L}_3\boldsymbol{A}_3=\boldsymbol{I}_3$，但却存在多个 3×2 矩阵 $\boldsymbol{R}$，使得 $\boldsymbol{A}_3\boldsymbol{R}=\boldsymbol{I}_2$，例如

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & 0\\ 3 & -1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}-1 & 1\\ 0 & 0\\ 2 & -1\end{bmatrix},\ \cdots$$

总结以上讨论知，除了满足 $\boldsymbol{AA}^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 外，还存在两种其他形式的逆矩阵，它们只满足 $\boldsymbol{LA}=\boldsymbol{I}$ 或 $\boldsymbol{AR}=\boldsymbol{I}$。

定义 1.8.1 [411] 满足 $\boldsymbol{LA}=\boldsymbol{I}$，但不满足 $\boldsymbol{AL}=\boldsymbol{I}$ 的矩阵 $\boldsymbol{L}$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**左逆矩阵** (left inverse)。类似地，满足 $\boldsymbol{AR}=\boldsymbol{I}$，但不满足 $\boldsymbol{RA}=\boldsymbol{I}$ 的矩阵称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的**右逆矩阵** (right inverse)。

定理 1.8.1 仅当 $m\geqslant n$ 时，矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}$ 可能有左逆矩阵。

证明 当 $m\geqslant n$ 时，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以分块为 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix}$，其中，$\boldsymbol{B}\in C^{n\times n}$ 和 $\boldsymbol{C}\in C^{(m-n)\times n}$。令 $\boldsymbol{L}=[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]$ 满足 $\boldsymbol{LA}=\boldsymbol{I}$，则有 $\boldsymbol{XB}+\boldsymbol{YC}=\boldsymbol{I}$。因此，只要矩阵 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Y}$ 满足 $\boldsymbol{XB}+\boldsymbol{YC}=\boldsymbol{I}$，矩阵 $\boldsymbol{L}=[\boldsymbol{X},\boldsymbol{Y}]$ 就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左逆矩阵。例如，若 $\boldsymbol{B}$ 非奇异，则只要取 $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{B}^{-1}$ 和 $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{O}$ 即可。

对于 $m < n$，将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分块为 $[\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}]$，矩阵 $\boldsymbol{L}$ 分块为 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}\\ \boldsymbol{Y}\end{bmatrix}$。若假定 $\boldsymbol{L}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左逆矩阵，则

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}\\ \boldsymbol{Y}\end{bmatrix}[\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}] = \begin{bmatrix}\boldsymbol{XB} & \boldsymbol{XC}\\ \boldsymbol{YB} & \boldsymbol{YC}\end{bmatrix} = \boldsymbol{I}_{n\times n} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{m\times m} & \boldsymbol{O}_{m\times(n-m)}\\ \boldsymbol{O}_{(n-m)\times m} & \boldsymbol{I}_{(m-n)\times(m-n)}\end{bmatrix}$$

即有

$$\boldsymbol{XB} = \boldsymbol{I}_{m\times m} \tag{1}$$

$$\boldsymbol{XC} = \boldsymbol{O}_{m\times(n-m)} \tag{2}$$

$$\boldsymbol{YB} = \boldsymbol{O}_{(n-m)\times m} \tag{3}$$

$$\boldsymbol{YC} = \boldsymbol{I}_{(n-m)\times(n-m)} \tag{4}$$

若 $\boldsymbol{B}$ 非奇异，则 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{B}^{-1}$。将这一结果代入式 (2)，立即知 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{O}_{m\times(n-m)}$。但是，这样一来，即有 $\boldsymbol{YC} = \boldsymbol{O}_{(n-m)\times(n-m)}$，与式 (4) 相矛盾，即与 $\boldsymbol{L}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左逆矩阵这一假设矛盾。 ■

定理 1.8.2 仅当 $m \leqslant n$ 时，矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}$ 可能有右逆矩阵。

证明 与定理 1.8.1 的证明类似。

作为定理 1.8.1 和定理 1.8.2 的特例，矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times m}$ 可能既有左逆矩阵，又有右逆矩阵。显然，当一个正方矩阵的左逆矩阵和右逆矩阵相等时，这一矩阵是非奇异的。因此，逆矩阵是既满足左逆矩阵，又满足右逆矩阵，并且左和右逆矩阵相等的特殊矩阵。

如例 1.8.1 所示，对于给定的 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，当 $m > n$ 时，可能存在多个 $n \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{L}$ 使得 $\boldsymbol{LA} = \boldsymbol{I}_n$；而当 $m < n$ 时，则可能有多个 $n \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{R}$ 满足 $\boldsymbol{AR} = \boldsymbol{I}_m$，即一个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左逆矩阵或者右逆矩阵往往非唯一。下面考虑左和右逆矩阵的唯一解。

考察 $m > n$ 并且 $\boldsymbol{A}$ 具有满列秩 ($\text{rank}\,\boldsymbol{A} = n$) 的情况。此时，$n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 是可逆的。容易验证

$$\boldsymbol{L} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \tag{1.8.1}$$

满足左逆矩阵的定义 $\boldsymbol{LA} = \boldsymbol{I}$。这种左逆矩阵是唯一的，常称为左伪逆矩阵 (left pseudo inverse)。

再考察 $m < n$ 并且 $\boldsymbol{A}$ 具有满行秩 ($\text{rank}\,\boldsymbol{A} = m$) 的情况。此时，$m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}$ 是可逆的。定义

$$\boldsymbol{R} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}})^{-1} \tag{1.8.2}$$

不难验证，它满足右逆矩阵的定义 $\boldsymbol{AR} = \boldsymbol{I}$。这一特殊的右逆矩阵也是唯一的，常称之为右伪逆矩阵 (right pseudo inverse)。

左伪逆矩阵与超定方程的最小二乘解密切相关，而右伪逆矩阵则与欠定方程的最小二乘最小范数解密切联系在一起。

1.8.2 广义逆矩阵的定义及性质

至此，我们从不同的角度讨论了矩阵求逆的三种情况：逆矩阵、左逆矩阵和右逆矩阵。下面从线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 求解的统一角度出发，对矩阵求逆作更加广泛和深入的讨论。

考虑 $m \times n$ 阶的一般矩阵 $\boldsymbol{A}$，其秩 k 可能小于 $\min\{m, n\}$。我们的问题是：是否存在某种合适意义下的逆矩阵，使得线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 的解可以用这种逆矩阵表示？

为了回答上述问题，让我们先来考虑两个方程

$$x_1 + x_2 = 4$$
$$3x_1 + 3x_2 = 9$$

显然，若其中一个方程为真，则另一个方程就不可能为真。就是说，两个方程相矛盾或非一致。这样的方程称为非一致方程 (inconsistent equation)。推而广之，一线性方程组称为非一致方程，若其中一些方程为真，而另一些方程不可能为真。换言之，非一致方程不存在使原方程组严格成立的任何解。因此，为了保证线性方程有解，要求方程组必须是一致方程。

粗略地讲，一个方程组称为一致方程 (consistent equation)，若至少存在一个解能够严格满足该方程组。更严格地，可以引出一致方程 (组) 的下列数学定义。

定义 1.8.2[411] 线性方程 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} = \boldsymbol{y}_{m\times 1}$ 称为一致方程，若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行之间存在的线性关系也存在于向量 $\boldsymbol{y}$ 的对应元素中。

注意，这一定义并没有要求一致方程中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的某两行或多行之间一定存在线性关系，只是说：若矩阵 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 为一致方程，并且矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行之间存在某种线性关系，则这样一种线性关系也必须存在于向量 $\boldsymbol{y}$ 的对应元素之间。譬如，在上面的方程中，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 2 行是第 1 行的 3 倍，但由于 $\boldsymbol{y} = [4, 9]^{\mathrm{T}}$ 的第 2 个元素不是第 1 个元素的 3 倍，所以不是一个一致方程。

下面的定理描述了方程一致性的重要性。

定理 1.8.3 一线性方程组可以求解，当且仅当这些方程为一致方程。

证明 见文献 [411, pp.229~230]。

换言之，一致方程可以求解 (一个解或多个解)，而非一致方程不可能有解。

下面的定理给出了检验方程一致性的一种方法。

定理 1.8.4 线性方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 是一致的，当且仅当增广矩阵 $[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{y}]$ 的秩等于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的秩，即 $\mathrm{rank}([\boldsymbol{A}, \boldsymbol{y}]) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$。

证明 [240, p.210] 令 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$，则 $\boldsymbol{A}$ 的秩等于列空间 $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\}$ 的维数，即

$$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = \dim\left(\mathrm{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\}\right)$$

类似地，增广矩阵 $[\boldsymbol{A},\boldsymbol{y}]$ 的秩 $\text{rank}([\boldsymbol{A},\boldsymbol{y}])$ 等于增广矩阵的列空间的维数，即

$$\text{rank}([\boldsymbol{A},\boldsymbol{y}]) = \dim\left(\text{Span}\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n,\boldsymbol{y}\}\right)$$

另一方面，由定理 1.8.3 知，当且仅当线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 为一致方程时，线性方程有解 (等价于向量 $\boldsymbol{y}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个列向量的线性组合)。就是说，线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 为一致方程，当且仅当向量 $\boldsymbol{y}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个列向量的线性组合，即

$$\text{Span}\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n,\boldsymbol{y}\} = \text{Span}\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n\}$$

上式意味着 $\text{rank}([\boldsymbol{A},\boldsymbol{y}])=\text{rank}(\boldsymbol{A})$。综上所述，线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 为一致方程，当且仅当 $\text{rank}([\boldsymbol{A},\boldsymbol{y}])=\text{rank}(\boldsymbol{A})$。 ■

有了一致方程的有关知识后，就可转入讨论线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的求解问题，其中，$\boldsymbol{A}$ 是 $m\times n$ 矩阵，其秩任意；并且 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 分别是 $n\times 1$ 和 $m\times 1$ 阶向量。如果 $m=n$，且 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则线性方程组的解为 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{y}$。一个很自然的问题是：在 $m\neq n$ 和 $\boldsymbol{A}$ 为秩亏缺的情况下，是否存在一个与 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{y}$ 相类似的解，比如 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Gy}$ 是一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的解？由于矩阵 $\boldsymbol{G}$ 起着与逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 相同的作用，因此可以称 $\boldsymbol{G}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵 (generalized inverse)，或简称 g 逆。于是，有广义逆矩阵的一般定义如下。

定义 1.8.3 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，具有任意秩。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵是一个 $n\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{G}$，并使得当 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 为一致方程时，$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Gy}$ 是线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的解。

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵和一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 之间的关系可以用下面的定理表述。这一定理是 Rao 于 1962 年得到的 [381]。

定理 1.8.5 一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 对 $\boldsymbol{y}\neq\boldsymbol{0}$ 有解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Gy}$，当且仅当 $\boldsymbol{AGA}=\boldsymbol{A}$。

证明 令 $\boldsymbol{a}_j$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 j 列。考查方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{a}_j$。这一方程有解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{e}_j$，其中，$\boldsymbol{e}_j$ 是仅第 j 个元素为 1，其余元素全部为 0 的基本向量。由于 $\text{rank}[\boldsymbol{A},\boldsymbol{a}_j]=\text{rank}(\boldsymbol{A})$，故根据定理 1.8.4 知，方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{a}_j$ 是一致方程。因此，若方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 为一致方程，且有解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Gy}$，则一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{a}_j$ 有解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Ga}_j$。将这一解代入方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{a}_j$，得 $\boldsymbol{AGa}_j=\boldsymbol{a}_j$。由于这一结论对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有列向量都成立，故 $\boldsymbol{AGA}=\boldsymbol{A}$。

反之，若 $\boldsymbol{AGA}=\boldsymbol{A}$，则 $\boldsymbol{AGAx}=\boldsymbol{Ax}$。将 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 代入 $\boldsymbol{AGAx}=\boldsymbol{Ax}$，直接有 $\boldsymbol{AGy}=\boldsymbol{y}$ 或 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{Gy})=\boldsymbol{y}$。因此，$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Gy}$ 是方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的解。 ■

命题 1.8.1 方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的解与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意行正交，并且线性无关。

证明 首先，方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 一定是一致方程。这是因为，不论在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行之间存在何种线性关系，这些线性关系也一定存在于零向量 $\boldsymbol{0}$ 的相应元素之中。因此，线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 一定是可解的。然后，令 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意一行，并且 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 是方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的一个解，则有 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{x}}=0$。这表明，解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意行正交。由解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意行之间的正交性知，解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 不可能是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行向量的线性组合，即 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行线性无关。 ■

$m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 用符号 $\boldsymbol{A}^-$ 表示，即 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{A}^-$。广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^-$ 具有下面的两个重要性质 [383,pp.20~21]。

引理 1.8.1 A^- 存在 $\Leftrightarrow AA^-A = A$。

证明 (1) $\Rightarrow$ 的证明。令 $y = Az$，其中，z 是一个 $n \times 1$ 任意向量，则线性方程 $Ax = y$ 一定是一致方程，因为增广矩阵 $[A, y] = [A, Az]$ 的秩与 A 的秩相等。因此，广义逆矩阵 A^- 的存在意味着

$$A(A^-Az) = A(A^-y) = Az, \quad \forall z \quad \Rightarrow \quad AA^-A = A$$

(2) $\Leftarrow$ 的证明。假定 $AGA = A$，下面证明 G 就是矩阵 A 的广义逆矩阵 A^-。若 $Ax = y$ 为一致方程，则一定存在一个解向量 w 满足 $Aw = y$。由于 $AGA = A$，故 $AGAw = Aw \Rightarrow AGy = y$。这说明 Gy 满足线性方程 $Ax = y$，即 Gy 是线性方程 $Ax = y$ 的一个解向量。即是说，$G = A^-$。 ■

引理 1.8.2 下面结论为真：

(1) A^- 存在 $\Leftrightarrow H = A^-A$ 为幂等矩阵 (即 $H^2 = H$) 和 $\text{rank}(H) = \text{rank}(A)$。

(2) A^- 存在 $\Leftrightarrow F = AA^-$ 为幂等矩阵 (即 $F^2 = F$) 和 $\text{rank}(F) = \text{rank}(A)$。

证明 结论 (1) $\Rightarrow$ 的证明。由引理 1.8.1 知

$$A^- \text{ 存在} \quad \Rightarrow \quad AA^-A = A \;\Rightarrow\; A^-AA^-A = A^-A \;\Rightarrow\; H^2 = H$$

利用矩阵的秩的性质 $\text{rank}(AB) \leqslant \text{rank}(A)$ 或 $\text{rank}(AB) \leqslant \text{rank}(B)$，并注意到 $H = A^-A$ 和 $AH = AA^-A = A$，故有

$$\text{rank}(A) \geqslant \text{rank}(H) \geqslant \text{rank}(AH) = \text{rank}(A)$$

即有 $\text{rank}(A) = \text{rank}(H)$。

结论 (1) $\Leftarrow$ 的证明。假定 $H = A^-A$ 是幂等矩阵，并且 $\text{rank}(H) = \text{rank}(A)$。由 $H^2 = H$ 有

$$H(I - H) = O \;\Rightarrow\; A^-A(I - H) = O \;\Rightarrow\; A(I - A^-A) = O \;\Rightarrow AA^-A = A$$

类似地，可以证明结论 (2)。 ■

引理 1.8.1 和引理 1.8.2 分别启迪了广义逆矩阵的下面两种定义 [383,p.21]。

定义 1.8.4 $m \times n$ 矩阵 A 的广义逆矩阵是一个满足

$$AA^-A = A$$

的 $n \times m$ 矩阵 A^-。

定义 1.8.5 $m \times n$ 矩阵 A 的广义逆矩阵是满足下列条件之一的 $n \times m$ 矩阵 A^-：

(1) A^-A 为幂等矩阵，且 $\text{rank}(A^-A) = \text{rank}(A)$；

(2) AA^- 是幂等矩阵，且 $\text{rank}(AA^-) = \text{rank}(A)$。

根据定义 1.8.4 知，前面介绍过的逆矩阵、左逆矩阵和右逆矩阵都可以视为广义逆矩阵的特例：

(1) 逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 满足 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}$。

(2) 左逆矩阵 $\boldsymbol{L}$ 满足 $\boldsymbol{ALA}=\boldsymbol{A}$，因为 $\boldsymbol{LA}=\boldsymbol{I}$。自然地，左伪逆矩阵 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 也满足定义 1.8.4。

(3) 右逆矩阵 $\boldsymbol{R}$ 也满足 $\boldsymbol{ARA}=\boldsymbol{A}$，因为 $\boldsymbol{AR}=\boldsymbol{I}$。自然地，右伪逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{-1}$ 也满足定义 1.8.4。

若矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 有一个主子矩阵 $\boldsymbol{A}_{11}$ 非奇异，其秩 $r=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$，且 $\boldsymbol{A}$ 的分块形式为

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22}\end{bmatrix} \tag{1.8.3}$$

式中，$\boldsymbol{A}_{22}=\boldsymbol{A}_{21}\boldsymbol{A}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_{12}$，则广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-}$ 由

$$\boldsymbol{A}^{-}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11}^{-1} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix} \tag{1.8.4}$$

给出。

容易验证：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{A}&=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11}^{-1} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22}\end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{A}_{21}\boldsymbol{A}_{11}^{-1} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22}\end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{21}\boldsymbol{A}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_{12}\end{bmatrix}\end{aligned}$$

代入 $\boldsymbol{A}_{22}=\boldsymbol{A}_{21}\boldsymbol{A}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_{12}$，易知 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}$，即 $\boldsymbol{A}^{-}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的一个广义逆矩阵。

1.8.3 广义逆矩阵的计算

上面介绍了广义逆矩阵的定义与性质。然而，当我们需要应用广义逆矩阵解决某些实际问题时，必然会首先面临一个问题：给定一个矩阵 $\boldsymbol{A}$，如何求它的广义逆矩阵？这里给出求广义逆矩阵的一种实际方法，它的基础是矩阵的满秩分解。

定义 1.8.6 [236, p.123] 令 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 具有秩 r。若 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{FG}$，其中，$\boldsymbol{F}_{m\times r}$ 的秩为 r (满列秩矩阵)，且 $\boldsymbol{G}_{r\times n}$ 的秩也为 r (满行秩矩阵)，则称 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{FG}$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的满秩分解 (full-rank decomposition)。

那么，是不是任意一个矩阵都存在满秩分解呢？下面的命题给出了这个问题的肯定答案。

命题 1.8.2 [411] 一个秩为 r 的 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以分解为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{K}_{m\times r}\boldsymbol{L}_{r\times n} \tag{1.8.5}$$

式中，$\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{L}$ 分别具有满列秩和满行秩。

证明 存在 $m\times m$ 非奇异矩阵 $\boldsymbol{P}$ 和 $n\times n$ 非奇异矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 使得

$$\boldsymbol{PAQ}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O}_{r\times(n-r)}\\ \boldsymbol{O}_{(m-r)\times r} & \boldsymbol{O}_{(m-r)\times(n-r)}\end{bmatrix}$$

或等价为

$$A = P^{-1}\begin{bmatrix} I_r & O_{r\times(n-r)} \\ O_{(m-r)\times r} & O_{(m-r)\times(n-r)} \end{bmatrix} Q^{-1}$$

将逆矩阵 P^{-1} 和 Q^{-1} 分块为

$$P^{-1} = \left[K_{m\times r}, W_{m\times(n-r)}\right] \quad 和 \quad Q^{-1} = \begin{bmatrix} L_{r\times n} \\ Z_{(n-r)\times n} \end{bmatrix}$$

于是，有

$$A = [K, W]\begin{bmatrix} I_r & O \\ O & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} L \\ Z \end{bmatrix} = [K, O]\begin{bmatrix} L \\ Z \end{bmatrix} = K_{m\times r}L_{r\times n}$$

由于 P 是非奇异的，所以 P^{-1} 也是非奇异的，即 P^{-1} 的列是线性无关的。特别地，矩阵 K 的 r 列线性无关，故有 $\text{rank}(K) = r$，即 K 具有满列秩 (显然 $r \leqslant m$，即矩阵 K 的秩不可能大于它的行数)。类似地，可以证明 L 具有满行秩。 ■

下面归纳了秩为 r 的矩阵 $A_{m\times n}$ 的满秩分解算法 [236, p.124]。

算法 1.8.1 (矩阵的满秩分解算法)

步骤 1　利用行初等变换将矩阵 A 化为阶梯型，即

$$A \xrightarrow{E_1} [\ \ ] \xrightarrow{E_2} \cdots \xrightarrow{E_k} \begin{bmatrix} G_{r\times n} \\ O_{(m-r)\times n} \end{bmatrix}$$

步骤 2　对单位矩阵执行逆行初等变换，得到逆矩阵

$$I \xrightarrow{E_k^{-1}} [\ \ ] \xrightarrow{E_{k-1}^{-1}} \cdots \xrightarrow{E_1^{-1}} [\ \ ] = P^{-1}$$

步骤 3　利用逆矩阵 P^{-1} 的前 r 列构造矩阵 F。

步骤 4　书写满秩分解结果 $A = FG$。

步骤 2 中的逆行初等变换如下：

(1) 第 i 行和第 j 行的互换 $R_i \leftrightarrow R_j$ 的逆变换是 $R_j \leftrightarrow R_i$。

(2) 初等行变换 αR_i 的逆变换为 $\alpha^{-1}R_i$。

(3) 初等行变换 $R_i + \alpha R_j$ 的逆变换为 $R_i - \alpha R_j$。

一旦获得矩阵 $A_{m\times n}$ 的满秩分解后，即可根据下面的引理求出 A 的广义逆矩阵 A^-。

引理 1.8.3 [236, p.210]　若矩阵 $A_{m\times n}$ 具有秩 r，且其满秩分解为 $A = FG$，其中，$F_{m\times r}$ 为满列秩；$G_{r\times n}$ 为满行秩，则

$$A^- = G^{\mathrm T}(F^{\mathrm T}AG^{\mathrm T})^{-1}F^{\mathrm T} \tag{1.8.6}$$

是 A 的一个广义逆矩阵。

证明　首先注意到 $F_{m\times r}$ 和 $G_{r\times n}$ 分别是满列秩和满行秩矩阵，故 $r\times r$ 矩阵 $F^{\mathrm T}F$ 和 $GG^{\mathrm T}$ 都是满秩矩阵，它们的逆矩阵 $(F^{\mathrm T}F)^{-1}$ 和 $(GG^{\mathrm T})^{-1}$ 分别存在。于是，有

$$A^- = G^{\mathrm T}[(F^{\mathrm T}F)(GG)^{\mathrm T}]^{-1}F^{\mathrm T} = G^{\mathrm T}(GG^{\mathrm T})^{-1}(F^{\mathrm T}F)^{-1}F^{\mathrm T}$$

利用这一结果，容易验证

$$
\begin{aligned}
AA^{-}A &= AG^{T}(F^{T}AG^{T})^{-1}F^{T}A \\
&= FGG^{T}(GG^{T})^{-1}(F^{T}F)^{-1}F^{T}FG \\
&= FG = A
\end{aligned}
$$

即 A^{-} 满足广义逆矩阵的定义公式。 ■

总结以上讨论，即得以下算法。

算法 1.8.2 (广义逆矩阵的计算)

步骤 1 计算矩阵 $A_{m\times n}$ 的满秩分解 $A=FG$。

步骤 2 求广义逆矩阵 $A^{-}=G^{T}(F^{T}AG^{T})^{-1}F^{T}$。

下面是广义逆矩阵的递推计算公式。

(1) 令 A 是一个 $m\times n$ 矩阵，u 和 v 分别是 $m\times 1$ 和 $n\times 1$ 向量，则

$$
(A+uv^{T})^{-}=A^{-}-\frac{(A^{-}u)(v^{T}A^{-})}{1+v^{T}A^{-}u} \tag{1.8.7}
$$

其中，假定 $v^{T}A^{-}u\neq -1$。

(2) 分块矩阵的广义逆矩阵的计算公式 [389]

若

$$
M=\begin{bmatrix} A & C \\ C^{H} & B \end{bmatrix} \tag{1.8.8}
$$

式中，$A=X_1^{H}X_1, B=X_2^{H}X_2, C=X_1^{H}X_2$。若 $D=B-C^{H}A^{-}C$，则

$$
M^{-}=\begin{bmatrix} A^{-}+A^{-}CD^{-}C^{H}A^{-} & -A^{-}CD^{-} \\ -D^{-}C^{H}A^{-} & D^{-} \end{bmatrix} \tag{1.8.9}
$$

(3) 矩阵之和的广义逆矩阵的计算公式

若 $AA^{-}UBV=UBV$ (即 UBV 的列空间是 A 的列空间的子集) 和 $UBVA^{-}A=UBV$ (即 UBV 的行空间是 A 的行空间的子集)，则 $G=A+UBV$ 的广义逆矩阵 G^{-} 可以有以下求法：

$$
G_1^{-}=A^{-}-A^{-}(A^{-}+A^{-}UBVA^{-})^{-}A^{-}UBVA^{-} \tag{1.8.10}
$$

$$
G_2^{-}=A^{-}-A^{-}U(U+UBVA^{-}U)^{-}UBVA^{-} \tag{1.8.11}
$$

$$
G_3^{-}=A^{-}-A^{-}UB(B+BVA^{-}UB)^{-}BVA^{-} \tag{1.8.12}
$$

$$
G_4^{-}=A^{-}-A^{-}UBV(V+VA^{-}UBV)^{-}VA \tag{1.8.13}
$$

$$
G_5^{-}=A^{-}-A^{-}UBVA^{-}(A^{-}+A^{-}UBVA^{-})^{-}A^{-} \tag{1.8.14}
$$

其中，G_3^{-} 是 Harville 给出的 [205]，其他公式则由 Henderson 与 Searle 得出 [213]。

下面两小节分别讨论线性方程 $A_{m\times n}x_{n\times 1}=y_{m\times 1}$ 为一致方程和非一致方程时的具体求解以及相对应的广义逆矩阵的类型。

1.8.4 一致方程的最小范数解

举一个简单的例子，假定线性方程为

$$x_1 + 2x_2 = 10 \tag{1.8.15}$$

这显然是一个一致方程。

如图 1.8.1 所示，直线 $x_1 + 2x_2 = 10$ 上的所有点 (x_1, x_2) 都是方程 (1.8.15) 的解即通解。如果希望确定唯一的解，就必须增加某个约束条件，求满足该条件的唯一解。作为约束条件，这里要求得到的解 $\boldsymbol{x}$ 的范数为最小。这样得出的唯一解称为最小范数解。由于 $\boldsymbol{x}$ 的范数最小等同于向量 $\boldsymbol{x}$ 的端点与原点的距离最小，故最小范数解也称最短距离解。在本例中，“与原点的距离最短的解”为 (2,4)，见图 1.8.1。

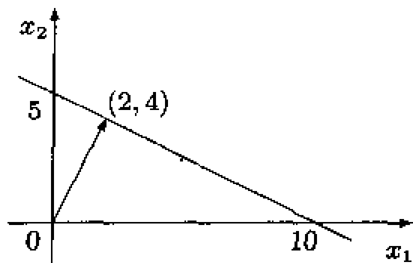


图 1.8.1 方程 (1.8.15) 的最小范数解

下面讨论一般情况下线性方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 的最小范数解。先讨论其通解。

定理 1.8.6 令 $n \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}^-$ 是 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意一个广义逆矩阵，则

(1) 齐次方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ 的一个通解为 $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^-\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$，其中，$\boldsymbol{z}$ 是 $n \times 1$ 任意向量。

(2) 非齐次方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 为一致方程的充分必要条件是

$$\boldsymbol{AA}^-\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y} \tag{1.8.16}$$

(3) 非齐次方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 的一个通解为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^-\boldsymbol{y} + (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^-\boldsymbol{A})\boldsymbol{z} \tag{1.8.17}$$

式中，$\boldsymbol{z}$ 为 $n \times 1$ 任意向量。

证明 (1) 利用广义逆矩阵的定义 1.8.4，容易验证

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^-\boldsymbol{A})\boldsymbol{z} = (\boldsymbol{A} - \boldsymbol{AA}^-\boldsymbol{A})\boldsymbol{z} = \boldsymbol{0}, \quad \forall \boldsymbol{z}$$

即 $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^-\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$ 是齐次方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ 的一个通解。

(2) 必要性由广义逆矩阵的定义 1.8.3 可立即得出，充分性显然。

(3) 利用 (1) 和 (2) 的结论，容易验证

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{AA}^-\boldsymbol{y} + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^-\boldsymbol{A})\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y} + \boldsymbol{0} = \boldsymbol{y}, \quad \forall \boldsymbol{z}$$

即 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{y}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{-}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$ 是非齐次方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ 的一个通解。 ■

由于对一个一致方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$，存在着通解公式 (1.8.17)，一个令我们感兴趣的问题是：是否存在一个与 $\boldsymbol{y}$ 无关的广义逆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 选择，使得解 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}$ 在所有的解中具有最小范数？换言之，如果广义逆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 存在的话，我们希望它满足条件

$$\min_{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}} \|\boldsymbol{x}\| = \|\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}\| \tag{1.8.18}$$

如果上式满足，则称 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}$ 为线性一致方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ 的最小范数解 (minimum norm solution)，并称广义逆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 为最小范数广义逆矩阵。

考虑矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 和向量 $\boldsymbol{x}_{n\times 1},\boldsymbol{y}_{m\times 1}$。于是，$\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$ 是 m 阶向量空间的内积，记作 $\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle_m$。矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的伴随矩阵用符号 $\boldsymbol{A}^{\#}_{n\times m}$ 表示，定义为将 m 阶向量空间的内积等价变换为 n 阶向量的内积的一个映射，即有

$$\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle_m = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{A}^{\#}\boldsymbol{y}\rangle_n \tag{1.8.19}$$

特别地，若 $\boldsymbol{A}^{\#}=\boldsymbol{A}$，则称 $\boldsymbol{A}$ 为自伴随矩阵。显然，自伴随矩阵一定是正方矩阵。

注意，这里的伴随矩阵与"逆矩阵"一节中的伴随矩阵的定义有所不同。根据定义式 (1.8.19)，容易证明伴随矩阵具有以下性质：

(1) $(\boldsymbol{A}^{\#})^{\#}=\boldsymbol{A}$。

(2) $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B})^{\#}=\boldsymbol{B}^{\#}\boldsymbol{A}^{\#}$。

(3) $\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{B}\boldsymbol{y}\rangle=0,\ \forall\,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\ \Leftrightarrow\ \boldsymbol{A}^{\#}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{O}$。

(4) $\boldsymbol{A}^{\#}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ (若 $\boldsymbol{A}$ 为实矩阵) 或 $\boldsymbol{A}^{\#}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ (若 $\boldsymbol{A}$ 为复矩阵)。

定理 1.8.7 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}$ 是一致方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ 的最小范数解，当且仅当

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A},\qquad (\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})^{\#}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{A} \tag{1.8.20}$$

证明 由定义 1.8.4 知，若 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}$ 是一致方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ 的一个解，则 $\boldsymbol{G}$ 必须是满足 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵。这就建立了式 (1.8.20) 的第一个条件。

下面证明式 (1.8.20) 的第二个条件。

由定理 1.8.5 知，一致方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}$ 的一个通解是 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$，其中，$\boldsymbol{z}$ 为任意向量。若 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}$ 为最小范数解，则

$$\|\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}\| \leqslant \|\boldsymbol{G}\boldsymbol{y}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}\|,\quad \forall\,\boldsymbol{z}$$

或者

$$\begin{aligned}
&\|\boldsymbol{G}\boldsymbol{A}\boldsymbol{b}\| \leqslant \|\boldsymbol{G}\boldsymbol{A}\boldsymbol{b}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}\|,\quad \forall\,\boldsymbol{b},\boldsymbol{z}\\
\Leftrightarrow\ &\langle \boldsymbol{G}\boldsymbol{A}\boldsymbol{b},(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}\rangle=0,\quad \forall\,\boldsymbol{b},\boldsymbol{z}\\
\Leftrightarrow\ &(\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})^{\#}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})=\boldsymbol{O}\\
\Leftrightarrow\ &(\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})^{\#}=(\boldsymbol{G}\boldsymbol{A})^{\#}\boldsymbol{G}\boldsymbol{A}
\end{aligned}$$

现在证明 $(GA)^{\#}=(GA)^{\#}GA$，当且仅当 $(GA)^{\#}=GA$。若 $(GA)^{\#}=GA$，则由于 $AGA=A$，容易验证 $(GA)^{\#}GA=GAGA=GA=(GA)^{\#}$。若 $(GA)^{\#}\neq GA$，则使用 $AGA=A$，易知

$$(GA)^{\#}GA=GA \Rightarrow GAGA\neq GA \Rightarrow GA\neq GA$$

这是个矛盾的结果。因此，$(GA)^{\#}\neq GA$ 之假设不能成立。这就证明了式 (1.8.20) 的第二个条件。 ■

关于最小范数解，有以下两点注释：

注释 1 充分必要条件 $AGA=A, (GA)^{\#}=GA$ 可以等价写作 $GAA^{\#}=A^{\#}$。

证明

$$GAA^{\#}=(GA)^{\#}A^{\#}=(AGA)^{\#}=A^{\#}$$

其中，分别利用了条件 $GA=(GA)^{\#}$，伴随矩阵的性质 $(AB)^{\#}=B^{\#}A^{\#}$ 和条件 $AGA=A$。 ■

注释 2 最小范数解是唯一的，虽然最小范数广义逆矩阵 G 有可能不唯一。

证明 令 G_1 和 G_2 是矩阵 A 的两个不同的广义逆矩阵。由注释 1 知 $G_iAA^{\#}=A^{\#}, i=1,2$，即有

$$(G_1-G_2)AA^{\#}=O \quad\Leftrightarrow\quad (G_1-G_2)A=O \quad\Leftrightarrow\quad G_1A=G_2A$$

由于 $Ax=y$ 是一致方程，有 $\mathrm{rank}([A,y])=\mathrm{rank}(A)$，故 y 可以写作 Ab，其中，b 是一个非零向量。于是，得

$$G_1Ab=G_2Ab \quad\Rightarrow\quad G_1y=G_2y$$

即最小范数解是唯一的。 ■

特别地，我们来讨论当 $A_{m\times n}$ 具有满行秩 m 时，线性方程 $Ax=y$ 的最小范数解。由于 A 满行秩，故增广矩阵 $[A,y]$ 的秩与 A 的秩相同，即线性方程 $Ax=y$ 是一致方程。另一方面，矩阵乘积 AA^{H} 可逆，故存在右伪逆矩阵 $A^{\mathrm{H}}(AA^{\mathrm{H}})^{-1}$。与之对应的解为

$$x^{\circ}=A^{\mathrm{H}}(AA^{\mathrm{H}})^{-1}y \tag{1.8.21}$$

下面证明，这一解就是满足式 (1.8.18) 的最小范数解。

令 x 是与 x° 不同的任意解，则

$$\|x\|^2=\|x^{\circ}+x-x^{\circ}\|^2=\|x^{\circ}\|^2+\|x-x^{\circ}\|^2+2(x^{\circ})^{\mathrm{H}}(x-x^{\circ}) \tag{1.8.22}$$

恒成立。由式 (1.8.21) 有

$$x^{\circ}=A^{\mathrm{H}}(AA^{\mathrm{H}})^{-1}Ax$$

及

$$\begin{aligned}(x^{\circ})^{\mathrm{H}}(x-x^{\circ})&=y^{\mathrm{H}}(AA^{\mathrm{H}})^{-1}A[I-A^{\mathrm{H}}(AA^{\mathrm{H}})^{-1}A]x\\&=y^{\mathrm{H}}[(AA^{\mathrm{H}})^{-1}A-(AA^{\mathrm{H}})^{-1}A]x=0\end{aligned}$$

于是，式 (1.8.22) 可简化为

$$\|\boldsymbol{x}\|^2=\|\boldsymbol{x}^\circ\|^2+\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^\circ\|^2$$

因向量范数 $\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}^\circ\|$ 不可能为负，故由上式得

$$\|\boldsymbol{x}\|^2\geqslant\|\boldsymbol{x}^\circ\|^2$$

即 $\boldsymbol{x}^\circ$ 确实是最小范数解。根据注释 2，这一最小范数解是唯一的。

事实上，右伪逆矩阵 $\boldsymbol{G}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1}$ 直接满足定理 1.8.7 的两个充分必要条件 $\boldsymbol{AGA}=\boldsymbol{A}$ 和 $(\boldsymbol{GA})^{\#}=\boldsymbol{GA}$，这是因为根据伴随矩阵的性质 $\boldsymbol{B}^{\#}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}$，有 $(\boldsymbol{GA})^{\#}=(\boldsymbol{GA})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{GA}$。于是，由定理 1.8.7 直接知，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{y}$ 是一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的最小范数解。

1.8.5 非一致方程的最小二乘解

考虑非一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的求解。由于是非一致方程，故不存在严格满足方程的解。换言之，非一致方程只能够有近似解。因此，我们很自然地希望寻找一个使得方程两边的误差平方和为最小的解。这样一种解称为非一致方程的最小二乘解。具体说来，若用 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 代表最小二乘解，则它应该满足

$$\|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{y}\|=\inf_{\boldsymbol{x}}\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{y}\| \tag{1.8.23}$$

式中，inf 表示函数的下确界。

定理 1.8.8 令 $\boldsymbol{G}$ 是某个矩阵，则 $\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{Gy}$ 是非一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的最小二乘解，当且仅当

$$\boldsymbol{A}^{\#}\boldsymbol{AG}=\boldsymbol{A}^{\#} \tag{1.8.24}$$

或者等价为

$$\boldsymbol{AGA}=\boldsymbol{A},\quad (\boldsymbol{AG})^{\#}=\boldsymbol{AG} \tag{1.8.25}$$

证明 由假设知

$$\|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{y}\|\leqslant\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{y}\|,\quad \forall\,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$$

代入 $\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{Gy}$，即有

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{AGy}-\boldsymbol{y}\|&\leqslant\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{y}\|,\quad \forall\,\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\\&\leqslant\|\boldsymbol{AGy}-\boldsymbol{y}+\boldsymbol{Aw}\|,\quad \forall\,\boldsymbol{y},\boldsymbol{w}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{Gy}\\&\Leftrightarrow\langle\boldsymbol{Aw},(\boldsymbol{AG}-\boldsymbol{I})\boldsymbol{y}\rangle=0,\quad \forall\,\boldsymbol{y},\boldsymbol{w}\\&\Leftrightarrow\boldsymbol{A}^{\#}(\boldsymbol{AG}-\boldsymbol{I})=\boldsymbol{O} &(1.8.26)\\&\Leftrightarrow\boldsymbol{A}^{\#}\boldsymbol{AG}=\boldsymbol{A}^{\#} &(1.8.27)\end{aligned}$$

式 (1.8.27) 两边同时右乘 $\boldsymbol{A}$ 得 $\boldsymbol{A}^{\#}(\boldsymbol{AGA}) = \boldsymbol{A}^{\#}\boldsymbol{A}$ 对任意矩阵 $\boldsymbol{A}$ 成立，故 $\boldsymbol{AGA} = \boldsymbol{A}$。式 (1.8.27) 两边左乘矩阵 $\boldsymbol{G}^{\#}$，并利用伴随矩阵性质 $(\boldsymbol{AB})^{\#} = \boldsymbol{B}^{\#}\boldsymbol{A}^{\#}$，则有

$$(\boldsymbol{AG})^{\#}\boldsymbol{AG} = (\boldsymbol{AG})^{\#}$$

上式成立的充分必要条件是 $(\boldsymbol{AG})^{\#} = \boldsymbol{AG}$，证明如下：

若 $(\boldsymbol{AG})^{\#} = \boldsymbol{AG}$，则 $(\boldsymbol{AG})^{\#}\boldsymbol{AG} = \boldsymbol{AGAG} = \boldsymbol{AG}$；令 $(\boldsymbol{AG})^{\#} \neq \boldsymbol{AG}$，则由 $(\boldsymbol{AG})^{\#}\boldsymbol{AG} = \boldsymbol{AG}$ 知

$$\boldsymbol{AGAG} \neq \boldsymbol{AG} \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{AG} \neq \boldsymbol{AG}$$

结果矛盾，故在 $(\boldsymbol{AG})^{\#}\boldsymbol{AG} = \boldsymbol{AG}$ 的情况下，$(\boldsymbol{AG})^{\#} \neq \boldsymbol{AG}$ 之假设不能成立。 ■

关于非一致方程的最小二乘解，有下面的两点注释：

注释 1 非一致方程的最小二乘解有可能不是唯一的，但是不同的最小二乘解得到的 $\boldsymbol{Ax}$ 和 $\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{y}$ 是唯一的。

注释 2 非一致方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 的最小二乘解的通解形式为

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{Gy} + (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{GA})\boldsymbol{z}, \quad \boldsymbol{z}\ 任意 \tag{1.8.28}$$

考虑非一致方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有满列秩的特殊情况。此时，矩阵乘积 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 非奇异。下面证明，解

$$\boldsymbol{x}^{\circ} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y} \tag{1.8.29}$$

就是一个最小二乘解。

令 $\boldsymbol{x}$ 是任何其他一个解，易知

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{y}\|^2 &= \|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\circ}) + \boldsymbol{Ax}^{\circ} - \boldsymbol{y}\|^2 \\ &= \|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\circ}) + [\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} - \boldsymbol{I}_m]\boldsymbol{y}\|^2 \\ &= \|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\circ})\|^2 + \|[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} - \boldsymbol{I}_m]\boldsymbol{y}\|^2 + \\ &\quad 2[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\circ})]^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} - \boldsymbol{I}_m]\boldsymbol{y}\end{aligned} \tag{1.8.30}$$

但是最后一个等式的第三项等于零，即

$$\begin{aligned}&[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\circ})]^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} - \boldsymbol{I}_m]\boldsymbol{y} \\ &= (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\circ})^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} - \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}]\boldsymbol{y} \\ &= (\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\circ})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} - \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{y} = 0\end{aligned}$$

因此，式 (1.8.30) 简化为

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{y}\|^2 &= \|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\circ})\|^2 + \|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{y}\|^2 \\ &= \|\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{x}^{\circ})\|^2 + \|\boldsymbol{Ax}^{\circ} - \boldsymbol{y}\|^2\end{aligned} \tag{1.8.31}$$

由于 $\|A(x-x^{\circ})\|^2 \geqslant 0$，故式 (1.8.31) 给出下列结果：

$$\|Ax-y\|^2 \geqslant \|Ax^{\circ}-y\|^2, \qquad \forall\, x, y$$

即是说，x° 确实是矩阵 A 满列秩时，非一致方程 $Ax=y$ 的一个最小二乘解。

事实上，由伴随矩阵性质 $B^{\#}=B^{H}$ 知 $(AG)^{\#}=(AG)^{H}=G^{H}A^{H}=A(AA^{H})^{-1}A^{H}=AG$，即左伪逆矩阵 $G=(A^{H}A)^{-1}A^{H}$ 直接满足定理 1.8.8 的两个充分必要条件 $AGA=A$ 和 $(AG)^{\#}=AG$。因此，由定理 1.8.8 直接知，$(A^{H}A)^{-1}A^{H}y$ 是非一致方程 $Ax=y$ 的最小二乘解。

1.9 Moore-Penrose 逆矩阵

在上一节，我们看到：广义逆矩阵包含了逆矩阵、左逆矩阵和右逆矩阵在内，并且可以提供参数个数与方程个数不同时，一致方程的最小范数解和非一致方程的最小二乘解。然而，由于最小二乘解是非唯一的，存在通解形式，两个自然会问的问题是"是否存在某种意义下的唯一解？""若存在唯一解，那么广义逆矩阵 $AGA=A$ 还能够有效吗？"前一个问题的回答是肯定的，而后一个问题的答案则是否定的。换言之，当需要得到非一致方程的唯一解时，需要将广义逆矩阵的定义再作推广。推广的思路是：只将上一节的广义逆矩阵定义公式 $AGA=A$ 作为定义的条件之一，并且再增加其他条件，得到另一种涵义更加广泛的广义逆矩阵。

1.9.1 Moore-Penrose 逆矩阵的定义与性质

令 P_S 表示到向量空间 S 上的正交投影，即对任意向量 x，有 $P_S x$ 在空间 S 上，而 $x-P_S x$ 与子空间 S 正交。对于任意一个 $m\times n$ 复矩阵 G，令 Range(G) 表示 G 的值域空间。Moore 于 1935 年证明了 [322]，矩阵 G 的广义逆矩阵 $G^{\dagger}$ 必须满足条件

$$GG^{\dagger}=P_{\text{Range}(G)}, \qquad G^{\dagger}G=P_{\text{Range}(G^{H})} \tag{1.9.1}$$

上述两个条件称为 Moore 条件，满足 Moore 条件的矩阵 $G^{\dagger}$ 称为矩阵 G 的 Moore 逆矩阵。由于这样一种定义不方便使用，Penrose 于 1955 年提出了定义广义逆矩阵的另外一组条件 [364]。

定义 1.9.1 [364] 令 A 是任意 $m\times n$ 矩阵，称矩阵 G 是 A 的广义逆矩阵，若 G 满足以下四个条件 (常称 Moore-Penrose 条件)：

(1) $AGA=A$；

(2) $GAG=G$；

(3) AG 为 Hermitian 矩阵，即 $(AG)^{H}=AG$；

(4) GA 为 Hermitian 矩阵，即 $(GA)^{H}=GA$。

1956 年，Rado[378] 证明了 Penrose 的定义与 Moore 的定义等价。

根据满足 Moore-Penrose 四条件的多少，可以对广义逆矩阵进行分类 [173]：

① 只满足条件 (1) 和 (2) 的矩阵 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{A}^{\dagger}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的自反广义逆矩阵 (reflexive generalized inverse)；

② 满足条件 (1)，(2) 和 (3) 的矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的正规化广义逆矩阵 (normalized generalized inverse)；

③ 满足条件 (1)，(2) 和 (4) 的矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的弱广义逆矩阵 (weak generalized inverse)；

④ 满足全部四个条件的矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵。

在有些文献 (如 [372]，[373]) 中，自反广义逆矩阵称为双条件广义逆矩阵 (two-condition generalized inverse) 或 g_2 广义逆矩阵，而正规化广义逆矩阵称为三条件广义逆矩阵 (three condition generalized inverse) 或者 g_3 广义逆矩阵。这两种广义逆矩阵在某些统计应用中有用 [373]。

注意，对于只满足某些条件的广义逆矩阵，它的秩与原矩阵的秩不一定相等。

定理 1.9.1 关于一般广义逆矩阵的秩，下列结果为真：

(1) 若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{g}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意一种广义逆矩阵，则

$$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{g}}) \geqslant \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{g}}\boldsymbol{A}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{g}})$$

(2) 秩 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{g}}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$ 的一个充要条件是：$\boldsymbol{A}^{\mathrm{g}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的自反广义逆矩阵。

证明 参见文献 [390]。

从上述四个条件出发，Penrose 推导出了 Moore-Penrose 逆矩阵的下列性质 [364]：

(1) $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger} = (\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}$；

(2) $\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$；

(3) $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}$；

(4) $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}$，$\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}$，$(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})$ 和 $(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})$ 分别为幂等矩阵。

容易验证，逆矩阵和上节介绍的各种广义逆矩阵都是 Moore-Penrose 逆矩阵的特例：

(1) $n \times n$ 正方非奇异矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 满足 Moore-Penrose 逆矩阵的所有四个条件。

(2) $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ $(m > n)$ 的左伪逆矩阵 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 满足 Moore-Penrose 逆矩阵的全部四个条件。

(3) $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ $(m < n)$ 的右伪逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1}$ 也满足 Moore-Penrose 逆矩阵的所有四个条件。

(4) 满足 $\boldsymbol{L}\boldsymbol{A}_{m\times n} = \boldsymbol{I}_n$ 的一般左逆矩阵 $\boldsymbol{L}_{n\times m}$ 是满足 Moore-Penrose 条件 (1),(2),(4) 的弱广义逆矩阵。

(5) 满足 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{I}_m$ 的一般右逆矩阵是满足 Moore-Penrose 条件 (1),(2),(3) 的正规化广义逆矩阵。

(6) 广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-}$ 只满足 Moore-Penrose 条件 (1)。

与左逆矩阵 $\boldsymbol{L}$，右逆矩阵 $\boldsymbol{R}$ 和广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^-$ 存在多值性不同，Moore-Penrose 逆矩阵是唯一定义的。在一般的文献中，为了与其他的广义逆矩阵相区别，常用符号 $\boldsymbol{A}^\dagger$ 表示 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵。又由于 Moore-Penrose 逆矩阵包含了各种广义逆矩阵在内，故一般文献还用广义逆矩阵作为 Moore-Penrose 逆矩阵的简称。本书今后对 Moore-Penrose 逆矩阵也沿用这一习惯符号和简称，而对只满足 $\boldsymbol{AGA}=\boldsymbol{A}$ 定义的广义逆矩阵，则用符号 $\boldsymbol{A}^-$ 表示，以示区分。

特别需要注意的是，与 $(\boldsymbol{AB})^{-1}=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}$ 不同，一般情况下，矩阵乘积 $\boldsymbol{AB}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵 $(\boldsymbol{AB})^\dagger\neq\boldsymbol{B}^\dagger\boldsymbol{A}^\dagger$。例如，

$$\boldsymbol{A}=[1,0],\quad \boldsymbol{B}=[1,1]^{\mathrm{T}},\quad (\boldsymbol{AB})^\dagger=1,\quad \boldsymbol{B}^\dagger\boldsymbol{A}^\dagger=\frac{1}{2}$$

下面是 $(\boldsymbol{AB})^\dagger=\boldsymbol{B}^\dagger\boldsymbol{A}^\dagger$ 的充分必要条件。

定理 1.9.2 [194] 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是使得矩阵乘积 $\boldsymbol{AB}$ 存在的任意矩阵，则 $(\boldsymbol{AB})^\dagger=\boldsymbol{B}^\dagger\boldsymbol{A}^\dagger$ 的充分必要条件为以下之一：

(1) $\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{ABB}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{BB}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{BB}^\dagger\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AB}$；

(2) $\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{ABB}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{ABB}^\dagger$ 分别是 Hermitian 矩阵；

(3) $\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{ABB}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{ABB}^\dagger=\boldsymbol{BB}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$；

(4) $\boldsymbol{A}^\dagger\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{AB})^\dagger\boldsymbol{AB}$ 和 $\boldsymbol{BB}^\dagger\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AB}(\boldsymbol{AB})^\dagger$ 同时满足。

任意一个 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵都可以由 [52]

$$\boldsymbol{A}^\dagger=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^\dagger\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \tag{1.9.2}$$

或者 [190]

$$\boldsymbol{A}^\dagger=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}})^\dagger \tag{1.9.3}$$

确定。将以上公式代入定义 1.9.1，易知 $\boldsymbol{A}^\dagger$ 分别满足 Moore-Penrose 逆矩阵的四个条件。

综合以上讨论以及文献 [371]，[383]，[373]，[296]，[290]，可以将 Moore-Penrose 逆矩阵 $\boldsymbol{A}^\dagger$ 具有的性质汇总如下。

(1) 广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^\dagger$ 是唯一的。

(2) 矩阵共轭转置的广义逆矩阵等于广义逆矩阵的共轭转置，即 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^\dagger=(\boldsymbol{A}^\dagger)^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\dagger\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}\dagger}$。

(3) 广义逆矩阵的广义逆矩阵等于原矩阵，即 $(\boldsymbol{A}^\dagger)^\dagger=\boldsymbol{A}$。

(4) 若 $c\neq 0$，则 $(c\boldsymbol{A})^\dagger=\frac{1}{c}\boldsymbol{A}^\dagger$。

(5) 若 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_{11},d_{22},\cdots,d_{nn})$ 为 $n\times n$ 对角矩阵，则 $\boldsymbol{D}^\dagger=\mathrm{diag}(d_{11}^\dagger,d_{22}^\dagger,\cdots,d_{nn}^\dagger)$，其中，$d_{ii}^\dagger=d_{ii}^{-1}$ (若 $a_{ii}\neq 0$) 或者 $d_{ii}^\dagger=0$ (若 $d_{ii}=0$)。

(6) 零矩阵 $\boldsymbol{O}_{m\times n}$ 的广义逆矩阵为 $n\times m$ 零矩阵，即有 $\boldsymbol{O}_{m\times n}^{\dagger}=\boldsymbol{O}_{n\times m}$。

(7) 向量 $\boldsymbol{x}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵为 $\boldsymbol{x}^{\dagger}=(\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})^{-1}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}$。

(8) 对矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$，虽然 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\neq\boldsymbol{I}_m, \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\neq\boldsymbol{I}_n, \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}\neq\boldsymbol{I}_n$ 和 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\neq\boldsymbol{I}_m$，但下列结果却为真：

① $\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$

② $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$

③ $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$

④ $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$

⑤ $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}$

⑥ $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}$

⑦ $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}$

⑧ $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}=\boldsymbol{A}$

⑨ $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{A}^{\dagger}$

⑩ $\boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\dagger}$

(9) 任意矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的广义逆矩阵都可以由 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{\dagger}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 或 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}$ 确定。特别地，满秩矩阵的广义逆矩阵如下：

① 若 $\boldsymbol{A}$ 列满秩，则 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\dagger}$，即满列秩矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵退化为 $\boldsymbol{A}$ 的左伪逆矩阵。

② 若 $\boldsymbol{A}$ 行满秩，则 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{-1}$，即满行秩矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵退化为 $\boldsymbol{A}$ 的右伪逆矩阵。

③ 若 $\boldsymbol{A}$ 为非奇异的正方矩阵，则 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{A}^{-1}$，即非奇异矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵退化为 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵。

(10) 若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{D}\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}$，式中，$\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{I}$，并且 $\boldsymbol{D}$ 为对角矩阵，则 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{D}^{\dagger}\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$。

(11) 若 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}$，并且 $\boldsymbol{B}$ 列满秩，$\boldsymbol{C}$ 行满秩，则

$$\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{B}^{\dagger}=\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}})^{-1}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}$$

(12) 若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$，并且 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$，则 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{A}$。

(13) 若矩阵 $\boldsymbol{A}_i$ 相互正交，即 $\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_j=\boldsymbol{O}, i\neq j$，则

$$(\boldsymbol{A}_1+\boldsymbol{A}_2+\cdots+\boldsymbol{A}_m)^{\dagger}=\boldsymbol{A}_1^{\dagger}+\boldsymbol{A}_2^{\dagger}+\cdots+\boldsymbol{A}_m^{\dagger}$$

(14) $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}=(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\dagger}$。

(15) $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}$。

(16) 虽然一般矩阵 $(\boldsymbol{A}^m)^{\dagger}\neq(\boldsymbol{A}^{\dagger})^m$，但若 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$，则有 $(\boldsymbol{A}^m)^{\dagger}=(\boldsymbol{A}^{\dagger})^m$。

(17) 若 $\boldsymbol{A}$ 为 $m\times n$ 矩阵，则

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{m\times n} & \boldsymbol{O}_{m\times q}\\ \boldsymbol{O}_{p\times n} & \boldsymbol{O}_{p\times q}\end{bmatrix}^{\dagger}=\begin{bmatrix}(\boldsymbol{A}^{\dagger})_{n\times m} & \boldsymbol{O}_{n\times p}\\ \boldsymbol{O}_{q\times m} & \boldsymbol{O}_{q\times p}\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}_{p\times q} & \boldsymbol{O}_{p\times n}\\ \boldsymbol{O}_{m\times q} & \boldsymbol{A}_{m\times n}\end{bmatrix}^{\dagger}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}_{q\times p} & \boldsymbol{O}_{q\times m}\\ \boldsymbol{O}_{n\times p} & (\boldsymbol{A}^{\dagger})_{n\times m}\end{bmatrix}$$

(18) 关于广义逆矩阵的秩，有

$$\begin{aligned}\text{rank}(\boldsymbol{A}^{\dagger})&=\text{rank}(\boldsymbol{A})=\text{rank}(\boldsymbol{A}^{\text{H}})=\text{rank}(\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\\&=\text{rank}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})=\text{rank}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})=\text{rank}(\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})\end{aligned}$$

(19) 广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 的行空间相同，即 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 的行空间在 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 的行空间内，并且 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 的行空间也在 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 的行空间内。

(20) 广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 的列空间相同，即 $\text{Span}(\boldsymbol{A}^{\dagger})=\text{Span}(\boldsymbol{A}^{\text{H}})$ 或 $\text{Range}(\boldsymbol{A}^{\dagger})=\text{Range}(\boldsymbol{A}^{\text{H}})$。

(21) 令 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩 $\text{rank}(\boldsymbol{A})=n$，并且 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵 (称为左伪逆矩阵)，则

① 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 的列空间相同。

② 矩阵 $(\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})$ 的列空间是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间的正交补。

③ 矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 是幂等矩阵，即有 $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})^2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}$。

④ 矩阵 $\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 是幂等矩阵，即有 $(\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})^2=\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}$。

(22) 令 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩 $\text{rank}(\boldsymbol{A})=m$，并且 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{A}^{\text{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\text{H}})^{-1}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵 (称为右伪逆矩阵)，则

① 广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 与矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}$ 的列空间相同。

② 矩阵 $(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})$ 的列空间是矩阵 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 的列空间的正交补。

③ 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\text{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\text{H}})^{-1}\boldsymbol{A}$ 是幂等矩阵，即有 $(\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})^2=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}$。

④ 矩阵 $\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}$ 是幂等矩阵，即 $(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})^2=\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}$。

(23) 若 $\boldsymbol{A}$ 为 $m\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{B}$ 为 $m\times p$ 矩阵，则

$$[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]^{\dagger}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}^{\dagger}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{C}^{\dagger}+\boldsymbol{D})\\ \boldsymbol{C}^{\dagger}+\boldsymbol{D}\end{bmatrix}$$

式中，$\boldsymbol{C}=(\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger})\boldsymbol{B}$，并且

$$\boldsymbol{D}=(\boldsymbol{I}_p-\boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{C})[\boldsymbol{I}_p+(\boldsymbol{I}_p-\boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{C})\boldsymbol{B}^{\text{H}}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\text{H}}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{I}_p-\boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{C})]^{-1}\boldsymbol{B}^{\text{H}}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\text{H}}(\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}^{\dagger})$$

(24) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别为 $m\times n$ 和 $p\times n$ 矩阵，则

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{B}\end{bmatrix}^{\dagger}=[\boldsymbol{A}^{\dagger}-\boldsymbol{T}\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{\dagger},\boldsymbol{T}]$$

式中，$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{E}^{\dagger}+(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{E}^{\dagger}\boldsymbol{B})\boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\text{H}}\boldsymbol{B}^{\text{H}}\boldsymbol{K}(\boldsymbol{I}_p-\boldsymbol{E}\boldsymbol{E}^{\dagger})$，且 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})$ 和 $\boldsymbol{K}=[\boldsymbol{I}_p+(\boldsymbol{I}_p-\boldsymbol{E}\boldsymbol{E}^{\dagger})\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\text{H}}\boldsymbol{B}^{\text{H}}(\boldsymbol{I}_p-\boldsymbol{E}\boldsymbol{E}^{\dagger})]^{-1}$。

1.9.2 Moore-Penrose 逆矩阵的计算

假定 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 r，其中，$r \leqslant \min(m,n)$。下面介绍求 Moore-Penrose 逆矩阵 $\boldsymbol{A}^\dagger$ 的四种方法。

1. 方程求解法

Penrose [364] 在定义广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^\dagger$ 时，提出了计算 $\boldsymbol{A}^\dagger$ 的两步法如下：

第一步：分别求解矩阵方程

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A} \tag{1.9.4}$$

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \tag{1.9.5}$$

得到 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{Y}$。

第二步：计算广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^\dagger = \boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Y}$。

若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为 Hermitian 矩阵，则 Penrose 的上述方法可以简化，因为以上两个矩阵方程等价为一个矩阵方程

$$\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}, \quad 若\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A} \tag{1.9.6}$$

并且 Moore-Penrose 逆矩阵可以计算为

$$\boldsymbol{A}^\dagger = \boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}, \quad 若\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A} \tag{1.9.7}$$

虽然 $\boldsymbol{A}$ 一般不会是 Hermitian 矩阵，但是 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 分别是 Hermitian 矩阵。

总结以上讨论，可以得到计算 Moore-Penrose 逆矩阵的两种算法如下 [190]：

算法 1.9.1

步骤 1　计算矩阵 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$。

步骤 2　求解矩阵方程 $\boldsymbol{B}^2\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{B}$ 得到矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}$。

步骤 3　计算 $\boldsymbol{B}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵 $\boldsymbol{B}^\dagger = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^\dagger = \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}$。

步骤 4　计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵 $\boldsymbol{A}^\dagger = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^\dagger = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}^\dagger$。

算法 1.9.2

步骤 1　计算矩阵 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$。

步骤 2　求解矩阵方程 $\boldsymbol{B}^2\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{B}$ 得到矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}$。

步骤 3　计算 $\boldsymbol{B}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵 $\boldsymbol{B}^\dagger = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^\dagger = \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}$。

步骤 4　计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵 $\boldsymbol{A}^\dagger = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^\dagger\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{B}^\dagger\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$。

若矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的列数大于行数，则矩阵乘积 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的维数比 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 的维数小，故选择算法 1.9.1 可花费较少的计算量。反之，若 $\boldsymbol{A}$ 的行数大于列数，则选择算法 1.9.2。

例 1.9.1　令矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 2 & -1 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & -1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 1 & -1 & 0 \end{bmatrix}$$

由于其列数大于行数，故选择算法 1.9.1。

(1) 计算 3×3 矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，得

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\begin{bmatrix}8 & -2 & 4\\ -2 & 4 & 0\\ 4 & 0 & 4\end{bmatrix},\qquad (\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^2=\begin{bmatrix}84 & -24 & 48\\ -24 & 20 & -8\\ 48 & -8 & 32\end{bmatrix}$$

(2) 求解 $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^2\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，等价于求解以下三个方程：

$$\begin{bmatrix}84 & -24 & 48\\ -24 & 20 & -8\\ 48 & -8 & 32\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}8\\ -2\\ 4\end{bmatrix}\quad\Rightarrow\quad\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\frac{1}{6}\begin{bmatrix}2\\ 1\\ -2\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}84 & -24 & 48\\ -24 & 20 & -8\\ 48 & -8 & 32\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-2\\ 4\\ 0\end{bmatrix}\quad\Rightarrow\quad\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\frac{1}{6}\begin{bmatrix}1\\ 2\\ -1\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}84 & -24 & 48\\ -24 & 20 & -8\\ 48 & -8 & 32\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}4\\ 0\\ 4\end{bmatrix}\quad\Rightarrow\quad\begin{bmatrix}x_1\\ x_2\\ x_3\end{bmatrix}=\frac{1}{12}\begin{bmatrix}-4\\ -2\\ 7\end{bmatrix}$$

故

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}=\frac{1}{12}\begin{bmatrix}4 & 2 & -4\\ 2 & 4 & -2\\ -4 & -2 & 7\end{bmatrix}$$

(3) 计算

$$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{\dagger}=\boldsymbol{X}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}=\frac{1}{12}\begin{bmatrix}4 & 2 & -4\\ 2 & 4 & -2\\ -4 & -2 & 7\end{bmatrix}$$

(4) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵由

$$\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{\dagger}=\frac{1}{12}\begin{bmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 1\\ -1 & 1 & 0\\ 2 & -1 & 1\\ -1 & 0 & -1\\ 1 & 1 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}4 & 2 & -4\\ 2 & 4 & -2\\ -4 & -2 & 7\end{bmatrix}=\frac{1}{12}\begin{bmatrix}0 & 0 & 3\\ -2 & 2 & 5\\ -2 & 2 & 2\\ 2 & -2 & 1\\ 0 & 0 & -3\\ 6 & 6 & -6\end{bmatrix}$$

给出。容易验证，$\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 满足 Moore-Penrose 逆矩阵的四个条件。

2. KL 分解法

关于矩阵满秩分解的命题 1.8.2 给出了 Moore-Penrose 逆矩阵的一种计算方法，因为容易验证，若 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{K}\boldsymbol{L}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的满秩分解，则

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{K}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{L}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{K}^{\mathrm{H}}\tag{1.9.8}$$

满足定义 1.9.1 中的四个条件，故 $\boldsymbol{G}$ 是 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵。

3. 递推法

对矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的前 k 列进行分块 $\boldsymbol{A}_k=[\boldsymbol{A}_{k-1},\boldsymbol{a}_k]$，其中，$\boldsymbol{a}_k$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 列。于是，分块矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵 $\boldsymbol{A}_k^\dagger$ 可以由 $\boldsymbol{A}_{k-1}^\dagger$ 递推计算。当递推到 $k=n$ 时，即获得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵 $\boldsymbol{A}^\dagger$。这样一种列递推的算法是 Greville 于 1960 年提出的 [193]。

算法 1.9.3 (求 Moore-Penrose 逆矩阵的列递推算法)

初始值 $\boldsymbol{A}_1^\dagger=\boldsymbol{a}_1^\dagger=(\boldsymbol{a}_1^{\mathrm H}\boldsymbol{a}_1)^{-1}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm H}$。

递推　令 $k=2,3,\cdots,n$，进行以下计算：

$$\boldsymbol{d}_k=\boldsymbol{A}_{k-1}^\dagger\boldsymbol{a}_k$$

$$\boldsymbol{b}_k=\begin{cases}(1+\boldsymbol{d}_k^{\mathrm H}\boldsymbol{d}_k)^{-1}\boldsymbol{d}_k^{\mathrm H}\boldsymbol{A}_{k-1}^\dagger, & \boldsymbol{d}_k^{\mathrm H}\boldsymbol{d}_k\neq-1\\ (\boldsymbol{a}_k-\boldsymbol{A}_{k-1}\boldsymbol{d}_k)^\dagger, & \boldsymbol{d}_k^{\mathrm H}\boldsymbol{d}_k=-1\end{cases}$$

$$\boldsymbol{A}_k^\dagger=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{k-1}^\dagger-\boldsymbol{d}_k\boldsymbol{b}_k\\ \boldsymbol{b}_k\end{bmatrix}$$

上述列递推算法原则上适用于所有矩阵，但是当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行比列少的时候，为了减少递推次数，宜先使用列递推算法求出 $\boldsymbol{A}^{\mathrm H}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm H})^\dagger=\boldsymbol{A}^{\mathrm H\dagger}$，再利用 $\boldsymbol{A}^\dagger=(\boldsymbol{A}^{\mathrm H\dagger})^{\mathrm H}$ 之关系得到 $\boldsymbol{A}^\dagger$。

例 1.9.2　用算法 1.9.3 求矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&0&-1\\-1&1&-1\\0&-1&2\\1&1&1\end{bmatrix}$$

的 Moore-Penrose 逆矩阵。

解　(1) 令 $\boldsymbol{A}_2=[\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{a}_2]$，其中

$$\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{a}_1=\begin{bmatrix}1\\-1\\0\\1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{a}_2=\begin{bmatrix}0\\1\\-1\\1\end{bmatrix}$$

则有

$$\boldsymbol{A}_1^\dagger=\boldsymbol{a}_1^\dagger=(\boldsymbol{a}_1^{\mathrm T}\boldsymbol{a}_1)^{-1}\boldsymbol{a}_1^{\mathrm T}=\frac{1}{3}[1,-1,0,1]$$

(2) $\boldsymbol{d}_2=\boldsymbol{A}_1^\dagger\boldsymbol{a}_2=0$。

(3) $\boldsymbol{b}_2=(\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{d}_2)^\dagger=\boldsymbol{a}_2^\dagger=\frac{1}{3}[0,1,-1,1]^{\mathrm T}$。

(4) 计算

$$\boldsymbol{A}_2^\dagger=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1^\dagger-\boldsymbol{d}_2\boldsymbol{b}_2\\ \boldsymbol{b}_2\end{bmatrix}=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}1&-1&0&1\\0&1&-1&1\end{bmatrix}$$

(5) $\boldsymbol{d}_3=\boldsymbol{A}_2^\dagger\boldsymbol{a}_3=\frac{1}{3}\begin{bmatrix}1\\-2\end{bmatrix}$。

(6) $\boldsymbol{b}_3 = (\boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{d}_3)^\dagger = \frac{1}{4}[-1, 0, 1, 1]^\mathrm{T}$。

(7) 最后，得到 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵为

$$\boldsymbol{A}^\dagger = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_2^\dagger - \boldsymbol{d}_3\boldsymbol{b}_3 \\ \boldsymbol{b}_3 \end{bmatrix} = \frac{1}{12}\begin{bmatrix} 5 & -4 & -1 & 3 \\ -2 & 4 & -2 & 6 \\ -3 & 0 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

4\. 迹方法

已知矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的秩为 r。

算法 1.9.4 (求 Moore-Penrose 逆矩阵的迹方法) [369]

步骤 1　计算 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^\mathrm{T}$。

步骤 2　令 $\boldsymbol{C}_1 = \boldsymbol{I}$。

步骤 3　计算

$$\boldsymbol{C}_{i+1} = \frac{1}{i}\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{B})\boldsymbol{I} - \boldsymbol{C}_i\boldsymbol{B}, \quad i = 1, 2, \cdots, r-1$$

步骤 4　计算

$$\boldsymbol{A}^\dagger = \frac{r}{\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{B})}\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{A}^\mathrm{T}$$

注意，$\boldsymbol{C}_{i+1}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{O}$，$\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}_i\boldsymbol{B}) \neq 0$。

例 1.9.3　使用算法 1.9.4 求例 1.9.2 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵。

解　易知 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = 3$。

(1) 计算

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^\mathrm{T}\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 3 & 0 & 1 \\ 0 & 3 & -2 \\ 1 & -2 & 7 \end{bmatrix}$$

(2) 令

$$\boldsymbol{C}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

(3) 计算

$$\boldsymbol{C}_2 = \mathrm{tr}(\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{B})\boldsymbol{I} - \boldsymbol{C}_1\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 10 & 0 & -1 \\ 0 & 10 & 2 \\ -1 & 2 & 6 \end{bmatrix}$$

(4) 计算

$$\boldsymbol{C}_3 = \frac{1}{2}\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}_2\boldsymbol{B})\boldsymbol{I} - \boldsymbol{C}_2\boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 17 & -2 & -3 \\ -2 & 20 & 6 \\ -3 & 6 & 9 \end{bmatrix}$$

(5) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵

$$\boldsymbol{A}^\dagger = \frac{3\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{A}^\mathrm{T}}{\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}_3\boldsymbol{B})} = \frac{1}{48}\begin{bmatrix} 20 & -16 & -4 & 12 \\ -8 & 16 & -8 & 24 \\ -12 & 0 & 12 & 12 \end{bmatrix} = \frac{1}{12}\begin{bmatrix} 5 & -4 & -1 & 3 \\ -2 & 4 & -2 & 6 \\ -3 & 0 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

与例 1.9.2 使用算法 1.9.3 求得的结果相同。容易验证 $\boldsymbol{A}^\dagger$ 满足 Moore-Penrose 逆矩阵的四个定义条件。

1.9.3 非一致方程的最小范数最小二乘解

1.8.4 节介绍了一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的最小范数解，1.8.5 节又讨论了非一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的最小二乘解。注意，最小二乘解不是唯一的。现在讨论如何适当选择一个广义逆矩阵，以便在最小二乘解中获得一个具有最小范数的解。这样一种解称为非一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的最小范数最小二乘解 (minimum norm least squares solution)，也称半范数 (seminorm) 最小二乘解。下面介绍非一致方程的最小范数最小二乘解的有关理论 [383, pp.51~55]。

定义 1.9.2 对于非一致方程 $\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1}=\boldsymbol{y}_{m\times 1}$，矩阵 $\boldsymbol{G}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的最小范数最小二乘广义逆矩阵，若 $\boldsymbol{G}$ 满足条件

$$\|\boldsymbol{Gy}\|_n \leqslant \|\hat{\boldsymbol{x}}\|_n\ \forall\ \hat{\boldsymbol{x}} \in \{\hat{\boldsymbol{x}} : \|\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{y}\|_m \leqslant \|\boldsymbol{Az}-\boldsymbol{y}\|_m\ \forall\ \boldsymbol{y}\in R^m, \boldsymbol{z}\in R^n\} \tag{1.9.9}$$

式中，$\|\cdot\|_n$ 和 $\|\cdot\|_m$ 分别是在 R^n 和 R^m 空间的范数 (半范数)；花括号 $\{\cdot\}$ 表示 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 是非一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的最小二乘解，而 $\|\boldsymbol{Gy}\|_n \leqslant \|\hat{\boldsymbol{x}}\|_n$ 表示 $\boldsymbol{Gy}$ 是在所有的最小二乘解中具有最小范数的那个解。

定理 1.9.3 矩阵 $\boldsymbol{G}$ 使得 $\boldsymbol{Gy}$ 是非一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的最小范数最小二乘解，当且仅当 $\boldsymbol{G}$ 满足条件

$$\boldsymbol{AGA}=\boldsymbol{A},\quad (\boldsymbol{AG})^{\#}=\boldsymbol{AG},\quad \boldsymbol{GAG}=\boldsymbol{G},\quad (\boldsymbol{GA})^{\#}=\boldsymbol{GA} \tag{1.9.10}$$

式中，$\boldsymbol{A}^{\#}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的伴随矩阵。

证明 由定理 1.8.8 知，$\boldsymbol{Gy}$ 是非一致方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y}$ 的最小二乘解，当且仅当 $\boldsymbol{AGA}=\boldsymbol{A}, (\boldsymbol{AG})^{\#}=\boldsymbol{AG}$，即式 (1.9.10) 的前两个条件得证。又由式 (1.8.28) 知，非一致方程的最小二乘解的通解为 $\boldsymbol{Gy}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{GA})\boldsymbol{z}$。于是，有

$$\begin{aligned}
&\|\boldsymbol{Gy}\| \leqslant \|\boldsymbol{Gy}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{GA})\boldsymbol{z}\|,\quad \forall\ \boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\\
\Leftrightarrow\ &\langle \boldsymbol{Gy}, (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{GA})\boldsymbol{z}\rangle = 0,\quad \forall\ \boldsymbol{y},\boldsymbol{z}\\
\Leftrightarrow\ &\boldsymbol{G}^{\#}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{GA})=\boldsymbol{O}\\
\Leftrightarrow\ &\boldsymbol{G}^{\#}=\boldsymbol{G}^{\#}\boldsymbol{GA}
\end{aligned}$$

下面证明

$$\boldsymbol{G}^{\#}=\boldsymbol{G}^{\#}\boldsymbol{GA}\ \Leftrightarrow\ \boldsymbol{GAG}=\boldsymbol{G},\quad (\boldsymbol{GA})^{\#}=\boldsymbol{GA}$$

$\Leftarrow$ 的证明：若 $\boldsymbol{GAG}=\boldsymbol{G}$ 和 $(\boldsymbol{GA})^{\#}=\boldsymbol{GA}$，则

$$(\boldsymbol{GA})^{\#}\boldsymbol{G}=\boldsymbol{GAG}=\boldsymbol{G}\ \Rightarrow\ [(\boldsymbol{GA})^{\#}\boldsymbol{G}]^{\#}=\boldsymbol{G}^{\#}\ \Rightarrow\ \boldsymbol{G}^{\#}\boldsymbol{GA}=\boldsymbol{G}^{\#}$$

$\Rightarrow$ 的证明：易知

$$\boldsymbol{G}^{\#}=\boldsymbol{G}^{\#}\boldsymbol{GA}\ \Rightarrow\ \boldsymbol{G}^{\#}\boldsymbol{G}=\boldsymbol{G}^{\#}\boldsymbol{GAG}\ \Rightarrow\ \boldsymbol{G}=\boldsymbol{GAG}$$

和

$$\begin{aligned} G^{\#} = G^{\#}GA &\Rightarrow A^{\#}G^{\#} = A^{\#}G^{\#}GA \\ &\Rightarrow (GA)^{\#} = (GA)^{\#}GA \\ &\Rightarrow (GA)^{\#} = GA \end{aligned}$$

本定理得证。■

利用伴随矩阵的性质 $\boldsymbol{B}^{\#} = \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}$ 易知，定理 1.9.3 中的第二个条件 $(\boldsymbol{AG})^{\#} = \boldsymbol{AG}$ 即 $(\boldsymbol{AG})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{AG}$，第四个条件 $(\boldsymbol{GA})^{\#} = \boldsymbol{GA}$ 即 $(\boldsymbol{GA})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{GA}$。因此，定理 1.9.3 也可以等价表述为：矩阵 $\boldsymbol{G}$ 使得 $\boldsymbol{Gy}$ 是非一致方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{y}$ 的最小范数最小二乘解，当且仅当 $\boldsymbol{G}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵。

1.9.4 广义逆矩阵的阶数递推计算

在系统辨识中，一个时间序列通常表示成一个自回归 – 移动平均 (ARMA) 模型的输出。然而，在许多实际的情况下，ARMA(p,q) 过程的阶数 (p,q) 是未知的，因此系统辨识需要估计对应于不同可能阶次的 ARMA 模型的 AR 和 MA 参数，并确定最优阶数 (p,q)。这说明，一种阶数递推的系统辨识方法是非常有吸引力的。下面介绍本书作者等人提出的左、右伪逆矩阵的阶数递推计算方法 [519],[503]。

1. *左伪逆矩阵的阶数递推* [519],[503]

考虑 $n \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{F}_m$，并设 $\boldsymbol{F}^{\dagger} = (\boldsymbol{F}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_m)^{-1}\boldsymbol{F}_m^{\mathrm{H}}$ 是 $\boldsymbol{F}_m$ 的左伪逆矩阵。

定理 1.9.4 令

$$\boldsymbol{F}_m = [\boldsymbol{F}_{m-1} \;\; \boldsymbol{f}_m] \tag{1.9.11}$$

式中，$\boldsymbol{f}_m$ 是矩阵 $\boldsymbol{F}_m$ 的第 m 列，且 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{F}_m) = m$，则计算 $\boldsymbol{F}_m^{\dagger}$ 的递推公式由下式给出：

$$\boldsymbol{F}_m^{\dagger} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{F}_{m-1}^{\dagger} - \boldsymbol{F}_{m-1}^{\dagger}\boldsymbol{f}_m\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{H}}\Delta_m^{-1} \\ \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{H}}\Delta_m^{-1} \end{bmatrix} \tag{1.9.12}$$

式中

$$\boldsymbol{e}_m = [\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{F}_{m-1}\boldsymbol{F}_{m-1}^{\dagger}]\boldsymbol{f}_m \tag{1.9.13}$$

$$\Delta_m^{-1} = [\boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_m]^{-1} \tag{1.9.14}$$

且初始值为

$$\boldsymbol{F}_1^{\dagger} = \boldsymbol{f}_1^{\mathrm{H}}/(\boldsymbol{f}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_1) \tag{1.9.15}$$

证明 由矩阵 $\boldsymbol{F}_m$ 的分块形式，我们有

$$\boldsymbol{F}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_m = \begin{bmatrix} \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_{m-1} & \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m \\ \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_{m-1} & \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m \end{bmatrix}$$

令

$$(\boldsymbol{F}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_m)^{-1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X} & \boldsymbol{Y} \\ \boldsymbol{Z} & \boldsymbol{W} \end{bmatrix}$$

由逆矩阵的定义，立即有

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_{m-1} & \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m \\ \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_{m-1} & \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{X} & \boldsymbol{Y} \\ \boldsymbol{Z} & \boldsymbol{W} \end{bmatrix} = \boldsymbol{I}_m$$

上式即是

$$\begin{aligned} \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_{m-1}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m\boldsymbol{Z} &= \boldsymbol{I}_{m-1} \\ \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_{m-1}\boldsymbol{Y} + \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m\boldsymbol{W} &= 0 \\ \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_{m-1}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m\boldsymbol{Z} &= 0 \\ \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_{m-1}\boldsymbol{Y} + \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m\boldsymbol{W} &= 1 \end{aligned}$$

上述矩阵方程的解为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{X} &= [\boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}_{m-1}]^{-1}[\boldsymbol{I}_{m-1} - \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m\boldsymbol{Z}] \\ \boldsymbol{Y} &= -\boldsymbol{F}_{m-1}^{\dagger}\boldsymbol{f}_m\boldsymbol{\Delta}_m^{-1} \\ \boldsymbol{Z} &= -\boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{F}_{m-1})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Delta}_m^{-1} \\ \boldsymbol{W} &= [\boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}(I_n - \boldsymbol{F}_{m-1}\boldsymbol{F}_{m-1}^{\dagger})\boldsymbol{f}_m]^{-1} = \boldsymbol{\Delta}_m^{-1} \end{aligned}$$

根据左伪逆矩阵的定义，得到

$$\boldsymbol{F}_m^{\dagger} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X} & \boldsymbol{Y} \\ \boldsymbol{Z} & \boldsymbol{W} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{X}\boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{Y}\boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{Z}\boldsymbol{F}_{m-1}^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{W}\boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}} \end{bmatrix}$$

将 $\boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}, \boldsymbol{W}$ 值代入上式，立即得到式 (1.9.12)。 ■

2\. 右伪逆矩阵的阶数递推 [519]

考虑矩阵 $\boldsymbol{F}_m \in C^{n\times m}$，$n < m$。

定理 1.9.5 记 $\boldsymbol{F}_m = [\boldsymbol{F}_{m-1},\ \boldsymbol{f}_m]$，则右伪逆矩阵 $\boldsymbol{F}_m^{\dagger} = \boldsymbol{F}_m^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{F}_m\boldsymbol{F}_m^{\mathrm{H}})^{-1}$ 具有以下递推公式：

$$\boldsymbol{F}_m^{\dagger} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{F}_{m-1}^{\dagger} - \boldsymbol{\Delta}_m\boldsymbol{F}_{m-1}^{\dagger}\boldsymbol{f}_m\boldsymbol{c}_m \\ \boldsymbol{\Delta}_m\boldsymbol{c}_m^{\mathrm{H}} \end{bmatrix} \tag{1.9.16}$$

式中，$\boldsymbol{c}_m^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{f}_m^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{F}_{m-1}\boldsymbol{F}_{m-1}^{\dagger})$，$\boldsymbol{\Delta}_m = \boldsymbol{c}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_m$。递推的初始值为 $\boldsymbol{F}_1^{\dagger} = \boldsymbol{f}_1^{\mathrm{H}}/(\boldsymbol{f}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{f}_1)$。

证明 与定理 1.9.3 的证明完全类似，略。 ■

1.9.5 超定二维超越方程的求解

作为广义逆矩阵的一个重要应用，我们来考查二维信号处理中的一个基本问题：辨识二维实自回归 - 移动平均 (ARMA) 模型的移动平均 (MA) 参数。

令 ARMA$(p_1, p_2; q_1, q_2)$ 模型为

$$\sum_{i=0}^{p_1}\sum_{j=0}^{p_2} a_{ij} x(n_1 - i, n_2 - j) = \sum_{i=0}^{q_1}\sum_{j=0}^{q_2} b_{ij} e(n_1 - i, n_2 - j) \tag{1.9.17}$$

不失一般性，假定 $a_{00} = 1, q_1 \leqslant p_1, q_2 \leqslant p_2$，且不可观测的实输入激励 $e(n_1, n_2)$ 为二维正态白噪声，其均值为零，方差等于 σ^2。二维 ARMA 过程 $\{x(n_1, n_2)\}$ 的功率谱密度由下式给出：

$$P(\omega_1, \omega_2) = \left.\frac{B(z_1, z_2)B(z_1^{-1}, z_2^{-1})}{A(z_1, z_2)A(z_1^{-1}, z_2^{-1})}\sigma^2\right|_{z_1 = e^{j\omega_1}, z_2 = e^{j\omega_2}} \tag{1.9.18}$$

式中

$$A(z_1, z_2) = \sum_{i=0}^{p_1}\sum_{j=0}^{p_2} a_{ij} z_1^i z_2^j, \quad B(z_1, z_2) = \sum_{i=0}^{q_1}\sum_{j=0}^{q_2} b_{ij} z_1^i z_2^j$$

注意，多项式 $B(z_1, z_2)B(z_1^{-1}, z_2^{-1})$ 中的 $z_1^k z_2^m$ 和 $z_1^{-k} z_2^{-m}$ 项的系数相同，$z_1^k z_2^{-m}$ 和 $z_1^{-k} z_2^m$ 的系数相同，故总可以将式 (1.9.18) 的分子写作

$$B(z_1, z_2)B(z_1^{-1}, z_2^{-1})\sigma^2 = C(z_1, z_2) + D(z_1, z_2^{-1}) + D(z_1^{-1}, z_2) + C(z_1^{-1}, z_2^{-1}) \tag{1.9.19}$$

式中

$$C(z_1, z_2) = \sum_{i=0}^{q_1}\sum_{j=0}^{q_2} c_{ij} z_1^i z_2^j, \quad D(z_1, z_2^{-1}) = \sum_{i=0}^{q_1}\sum_{j=0}^{q_2} d_{ij} z_1^i z_2^{-j}$$

比较式 (1.9.19) 两边相同幂次项的系数，立即得

$$c_{00} = \frac{\sigma^2}{2}\sum_{i=0}^{q_1}\sum_{j=0}^{q_2} b_{ij}^2 \tag{1.9.20}$$

$$c_{km} = \sigma^2 \sum_{i=0}^{q_1}\sum_{j=0}^{q_2} b_{ij} b_{i+k, j+m}, \quad k = 0, 1, \cdots, q_1, \ m = 0, 1, \cdots, q_2, \ (k, m) \neq (0, 0) \tag{1.9.21}$$

$$d_{km} = \sigma^2 \sum_{i=0}^{q_1}\sum_{j=0}^{q_2} b_{ij} b_{i-k, j+m}, \quad k = 1, 2, \cdots, q_1, \ m = 1, 2, \cdots, q_2 \tag{1.9.22}$$

上述方程称为超定二维超越方程。二维 ARMA 模型的 MA 参数辨识问题的提法是：已知二维 MA 谱参数 c_{km} 和 d_{km} (这些参数的计算方法详见文献 [505])，求解超定二维超越方程式 (1.9.20) ~ 式 (1.9.21)，即得到二维 MA 参数 b_{ij}。

为了求解超定二维超越方程式 (1.9.20) ~ 式 (1.9.22)，定义估计误差

$$f_{0,0}=\sum_{i=0}^{q_1}\sum_{j=0}^{q_2}b_{ij}^2-2c_{0,0} \tag{1.9.23}$$

$$f_{k,m}=\sum_{i=0}^{q_1-k}\sum_{j=0}^{q_2-m}b_{i,j}b_{i+k,j+m}-c_{k,m}$$
$$k=0,1,\cdots,q_1,\ m=0,1,\cdots,q_2,\ (k,m)\neq(0,0) \tag{1.9.24}$$

$$f_{q_1+k,q_2+m}=\sum_{i=0}^{q_1-k}\sum_{j=0}^{q_2-m}b_{i,j}b_{i+k,j+m}-d_{k,m}$$
$$k=1,2,\cdots,q_1,\ m=1,2,\cdots,q_2 \tag{1.9.25}$$

记

$$\boldsymbol{f}=[f_{0,0},\cdots,f_{q_1,q_2},f_{q_1+1,q_2+1},\cdots,f_{2q_1,2q_2}]^{\mathrm{T}}$$
$$\boldsymbol{b}=[b_{0,0},b_{0,1},\cdots,b_{0,q_2},\cdots,b_{q_1,0},b_{q_1,1},\cdots,b_{q_1,q_2}]^{\mathrm{T}}$$

则梯度矩阵为

$$\boldsymbol{F}=\frac{\partial\boldsymbol{f}}{\partial\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f_{0,0}}{\partial b_{0,0}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{0,0}}{\partial b_{0,q_2}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{0,0}}{\partial b_{q_1,0}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{0,0}}{\partial b_{q_1,q_2}}\\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial f_{q_1,q_2}}{\partial b_{0,0}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{q_1,q_2}}{\partial b_{0,q_2}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{q_1,q_2}}{\partial b_{q_1,0}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{q_1,q_2}}{\partial b_{q_1,q_2}}\\ \hdashline \dfrac{\partial f_{q_1+1,q_2+1}}{\partial b_{0,0}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{q_1+1,q_2+1}}{\partial b_{0,q_2}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{q_1+1,q_2+1}}{\partial b_{q_1,0}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{q_1+1,q_2+1}}{\partial b_{q_1,q_2}}\\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial f_{2q_1,2q_2}}{\partial b_{0,0}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{2q_1,2q_2}}{\partial b_{0,q_2}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{2q_1,2q_2}}{\partial b_{q_1,0}} & \cdots & \dfrac{\partial f_{2q_1,2q_2}}{\partial b_{q_1,q_2}}\end{bmatrix} \tag{1.9.26}$$

定义矩阵

$$\boldsymbol{B}_i=\begin{bmatrix}b_{i,0} & \cdots & b_{i,q_2-1} & b_{i,q_2}\\ b_{i,1} & \cdots & b_{i,q_2} & 0\\ \vdots & ⋰ & \vdots & \vdots\\ b_{i,q_2} & \cdots & 0 & 0\end{bmatrix} \tag{1.9.27}$$

$$\bar{\boldsymbol{B}}_i=\begin{bmatrix}b_{i,0} & b_{i,1} & \cdots & b_{i,q_2}\\ 0 & b_{i,0} & \cdots & b_{i,q_2-1}\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & b_{i,0}\end{bmatrix} \tag{1.9.28}$$

和

$$
\boldsymbol{A}_i = \begin{bmatrix} 0 & b_{i,0} & b_{i,1} & \cdots & b_{i,q_2-1} \\ 0 & 0 & b_{i,0} & \cdots & b_{i,q_2-2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & b_{i,0} \end{bmatrix} \tag{1.9.29}
$$

$$
\bar{\boldsymbol{A}}_i = \begin{bmatrix} b_{i,1} & \cdots & b_{i,q_2-1} & b_{i,q_2} & 0 \\ b_{i,2} & \cdots & b_{i,q_2} & 0 & 0 \\ \vdots & \iddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ b_{i,q_2} & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{1.9.30}
$$

经过直接运算，不难得知，矩阵 $\boldsymbol{F}$ 具有下面更加紧凑的形式：

$$
\boldsymbol{F} = \left[\begin{array}{cccc} \boldsymbol{B}_0 & \cdots & \boldsymbol{B}_{q_1-1} & \boldsymbol{B}_{q_1} \\ \boldsymbol{B}_1 & \cdots & \boldsymbol{B}_{q_1} & \boldsymbol{O} \\ \vdots & \iddots & \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{B}_{q_1} & \cdots & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ \hdashline \boldsymbol{A}_1 & \cdots & \boldsymbol{A}_{q_1} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{A}_2 & \cdots & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \\ \vdots & \iddots & \vdots & \vdots \\ \boldsymbol{A}_{q_1} & \cdots & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{array}\right] + \left[\begin{array}{cccc} \bar{\boldsymbol{B}}_0 & \bar{\boldsymbol{B}}_1 & \cdots & \bar{\boldsymbol{B}}_{q_1} \\ \boldsymbol{O} & \bar{\boldsymbol{B}}_0 & \cdots & \bar{\boldsymbol{B}}_{q_1-1} \\ \vdots & \vdots & \iddots & \vdots \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \cdots & \bar{\boldsymbol{B}}_0 \\ \hdashline \boldsymbol{O} & \bar{\boldsymbol{A}}_0 & \cdots & \bar{\boldsymbol{A}}_{q_1-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \cdots & \bar{\boldsymbol{A}}_{q_1-2} \\ \vdots & \vdots & \iddots & \vdots \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \cdots & \bar{\boldsymbol{A}}_0 \end{array}\right] \tag{1.9.31}
$$

这样一来，我们即可运用 Newton-Raphson 算法求解超定的二维超越方程式 (1.9.20)~式 (1.9.22)。若第 i 步迭代估计的 MA 参数向量记为 $\boldsymbol{b}^{(i)}$，则第 $(i+1)$ 步的估计 $\boldsymbol{b}^{(i+1)}$ 由下式给出：

$$
\boldsymbol{b}^{(i+1)} = \boldsymbol{b}^{(i)} - \boldsymbol{F}^{\dagger}\boldsymbol{f} \tag{1.9.32}
$$

式中，$\boldsymbol{F}^{\dagger}$ 是矩阵 $\boldsymbol{F}$ 的广义逆矩阵。

算法 1.9.5 (二维 MA 参数估计) [505]

步骤 1 取初始值 $b_{0,0} = \sqrt{2c_{0,0}}$ 和 $b_{i,j} = 0,\ (i,j) \neq (0,0)$。

步骤 2 利用式 (1.9.23) ~ 式 (1.9.25) 计算拟合误差 $f_{k,m}$，然后利用式 (1.9.31) 构造矩阵 $\boldsymbol{F}$。

步骤 3 根据式 (1.9.32) 更新二维 MA 参数向量估计 $\boldsymbol{b}^{(i+1)}$。

步骤 4 返回步骤 2，并重复上述步骤，直至所有 MA 参数估计值 $b_{k,m}$ 都收敛为止。例如，当

$$
\left| \frac{b_{km}^{(i+1)} - b_{km}^{(i)}}{b_{km}^{(i+1)}} \right| \leqslant 0.05 \tag{1.9.33}
$$

对所有 $k = 0,1,\cdots,q_1,\ m = 0,1,\cdots,q_2$ 成立时，即认可参数估计已经收敛。

下节讨论两个矩阵之间的特殊求和以及特殊乘积。

1.10 Hadamard 积与 Kronecker 积

先讨论两个矩阵之间的特殊求和。

1.10.1 矩阵的直和

定义 1.10.1 [191] $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的直和记作 $\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B}$，它是一个 $(m+n)\times(m+n)$ 矩阵，定义为

$$\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}_{m\times n} \\ \boldsymbol{O}_{n\times m} & \boldsymbol{B} \end{bmatrix} \tag{1.10.1}$$

需要注意，两个矩阵的直和不是两个矩阵元素之间的任何求和运算，只是一种形式上的求和符号，其真实涵义是将两个矩阵按照对角线位置堆放，直接组合成一个更大维数的矩阵。类似地，还可以定义多个矩阵的直和，如 [214]

$$\boldsymbol{B} = \bigoplus_{i=0}^{N-1} \boldsymbol{A}_i = \boldsymbol{A}_0 \oplus \boldsymbol{A}_1 \oplus \cdots \oplus \boldsymbol{A}_{N-1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_0 & & & \\ & \boldsymbol{A}_1 & & \\ & & \ddots & \\ & & & \boldsymbol{A}_{N-1} \end{bmatrix} \tag{1.10.2}$$

根据定义，容易证明矩阵的直和具有以下性质 [224],[386]。

(1) 若 c 为常数，则 $c\,(\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B}) = c\boldsymbol{A} \oplus c\boldsymbol{B}$。

(2) 若 $\boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{B}$，则 $\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B} \neq \boldsymbol{B} \oplus \boldsymbol{A}$。

(3) 矩阵直和的复共轭、转置、复共轭转置与逆矩阵：

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B})^* &= \boldsymbol{A}^* \oplus \boldsymbol{B}^* \\ (\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B})^{\mathrm{T}} &= \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \oplus \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} \\ (\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B})^{\mathrm{H}} &= \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \oplus \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} \\ (\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B})^{-1} &= \boldsymbol{A}^{-1} \oplus \boldsymbol{B}^{-1}, \quad \boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\text{可逆} \end{aligned}$$

(4) 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 为 $m \times m$ 矩阵，且 $\boldsymbol{C},\boldsymbol{D}$ 为 $n \times n$ 矩阵，则

$$\begin{aligned} (\boldsymbol{A} \pm \boldsymbol{B}) \oplus (\boldsymbol{C} \pm \boldsymbol{D}) &= (\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{C}) \pm (\boldsymbol{B} \oplus \boldsymbol{D}) \\ (\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{C})(\boldsymbol{B} \oplus \boldsymbol{D}) &= \boldsymbol{AB} \oplus \boldsymbol{CD} \end{aligned}$$

(5) 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 分别是 $m \times m$, $n \times n$, $p \times p$ 矩阵，则

$$\boldsymbol{A} \oplus (\boldsymbol{B} \oplus \boldsymbol{C}) = (\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B}) \oplus \boldsymbol{C} = \boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B} \oplus \boldsymbol{C}$$

(6) 矩阵直和的迹、秩、行列式：

$$\mathrm{tr}\left(\bigoplus_{i=0}^{N-1} \boldsymbol{A}_i\right) = \sum_{i=0}^{N-1} \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}_i)$$

$$\mathrm{rank}\left(\bigoplus_{i=0}^{N-1} \boldsymbol{A}_i\right) = \sum_{i=0}^{N-1} \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}_i)$$

$$\det\left(\bigoplus_{i=0}^{N-1} \boldsymbol{A}_i\right) = \prod_{i=0}^{N-1} \det(\boldsymbol{A}_i)$$

(7) 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 分别是 $m \times m, n \times n$ 正交矩阵，则 $\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B}$ 是 $(m+n) \times (m+n)$ 正交矩阵。

1.10.2 Hadamard 积

现在考虑两个矩阵之间的直接乘积。

定义 1.10.2 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 与 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B} = [b_{ij}]$ 的 Hadamard 积记作 $\boldsymbol{A} \odot \boldsymbol{B}$，它仍然是一个 $m \times n$ 矩阵，定义为

$$\boldsymbol{A} \odot \boldsymbol{B} = [a_{ij} b_{ij}] \tag{1.10.3}$$

Hadamard 积也称 Schur 积或者对应元素乘积 (elementwise product)。矩阵 Hadamard 积的一个主要结果是下面的 Hadamard 积定理 [224]。

定理 1.10.1 若 $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 是正定 (或半正定) 的，则它们的 Hadamard 积 $\boldsymbol{A} \odot \boldsymbol{B}$ 也是正定 (或半正定) 的。

证明 令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的特征值分解为 $\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{m} \lambda_{A,i} \boldsymbol{u}_{A,i} \boldsymbol{u}_{A,i}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{B} = \sum_{i=1}^{m} \lambda_{B,i} \boldsymbol{u}_{B,i} \boldsymbol{u}_{B,i}^{\mathrm{H}}$。当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都是半正定的，并且 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = p$ 和 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{B}) = q$ 时，由于 $\lambda_{A,i} = 0,\ i = p+1, p+2, \cdots, m$ 和 $\lambda_{B,i} = 0,\ i = q+1, q+2, \cdots, m$，故 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 可以分别写成

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{v}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{v}_2 \boldsymbol{v}_2^{\mathrm{H}} + \cdots + \boldsymbol{v}_p \boldsymbol{v}_p^{\mathrm{H}}$$

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{w}_1 \boldsymbol{w}_1^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{w}_2 \boldsymbol{w}_2^{\mathrm{H}} + \cdots + \boldsymbol{w}_q \boldsymbol{w}_q^{\mathrm{H}}$$

式中，$\boldsymbol{v}_i = \lambda_{A,i}^{1/2} \boldsymbol{u}_{A,i}$，$\boldsymbol{w}_i = \lambda_{B,i}^{1/2} \boldsymbol{u}_{B,i}$。于是

$$\boldsymbol{A} \odot \boldsymbol{B} = \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{q} (\boldsymbol{v}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}) \odot (\boldsymbol{w}_j \boldsymbol{w}_j^{\mathrm{H}}) = \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{q} (\boldsymbol{v}_i \odot \boldsymbol{w}_j)(\boldsymbol{v}_i \odot \boldsymbol{w}_j)^{\mathrm{H}} = \sum_{i=1}^{p} \sum_{j=1}^{q} \boldsymbol{u}_{ij} \boldsymbol{u}_{ij}^{\mathrm{H}}$$

式中，$\boldsymbol{u}_{ij} = \boldsymbol{v}_i \odot \boldsymbol{w}_j$。上式表明，$\boldsymbol{A} \odot \boldsymbol{B}$ 是秩 1 半正定矩阵 $\boldsymbol{u}_{ij} \boldsymbol{u}_{ij}^{\mathrm{H}}$ 之和，所以 $\boldsymbol{A} \odot \boldsymbol{B}$ 也是半正定的。

下面证明当 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都是正定矩阵时，Hadamard 积 $\boldsymbol{A} \odot \boldsymbol{B}$ 也是正定的。此时，$p = q = m$，向量组 $\boldsymbol{v}_i\,(i = 1, 2, \cdots, p)$ 和 $\boldsymbol{w}_i\,(i = 1, 2, \cdots, q)$ 都是复空间 C^m 的正交基向量。

使用反证法，假设 $\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}$ 为奇异矩阵。于是，存在某个非零向量 $\boldsymbol{x}$ 使得 $(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$。前式两边同时左乘向量 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}$，即得

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{u}_{ij}\boldsymbol{u}_{ij}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}|\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_{ij}|^2=0$$

易知每一项都必须等于零，即

$$|\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_{ij}|^2=|\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{v}_i\odot\boldsymbol{w}_j)|^2=|(\boldsymbol{x}\odot\boldsymbol{v}_i^*)^{\mathrm{H}}\boldsymbol{w}_j|^2=0,\quad \forall i,j$$

由于向量 Hadamard 积 $\boldsymbol{x}\odot\boldsymbol{v}_i^*$ 与所有正交基向量 $\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\cdots,\boldsymbol{w}_m$ 的内积的模都等于零，故 $\boldsymbol{x}\odot\boldsymbol{v}_i=\boldsymbol{0},\ i=1,2,\cdots,m$。注意到 Hadamard 积 $\boldsymbol{x}\odot\boldsymbol{v}_i^*$ 是两个向量的对应元素之积，所以 $\boldsymbol{x}\odot\boldsymbol{v}_i=\boldsymbol{0},\ i=1,2,\cdots,m$ 意味着向量 $\boldsymbol{x}$ 的所有元素必定为零，即向量 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$。这与假设相矛盾，由此知 Hadamard 积 $\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}$ 一定是非奇异矩阵即正定矩阵。 ■

推论 1.10.1 (Fejer 定理)[224] 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times m$ 矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 是半正定矩阵，当且仅当

$$\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{m}a_{ij}b_{ij}\geqslant 0$$

对所有 $m\times m$ 半正定矩阵 $\boldsymbol{B}$ 成立。

下面的两个定理描述了矩阵的 Hadamard 积与迹之间的关系 [296, p.46]。

定理 1.10.2 令 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 为 $m\times n$ 矩阵，并且 $\boldsymbol{1}=[1,1,\cdots,1]^{\mathrm{T}}$ 为 $n\times 1$ 求和向量，$\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_m)$，其中，$d_i=\sum_{j=1}^{n}a_{ij}$，则

$$\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C})\right)=\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{C}\right)\tag{1.10.4}$$

和

$$\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C})\boldsymbol{1}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{C})\tag{1.10.5}$$

证明 注意到 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C})$ 和 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{C}$ 具有相同的对角元素，即

$$[\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C})]_{ii}=\sum_{k=1}^{n}a_{ki}b_{ki}c_{ki}=[(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{C}]_{ii}$$

这就证明了式 (1.10.4)。由于

$$\boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C})\boldsymbol{1}=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\sum_{k=1}^{m}a_{kj}b_{ki}c_{ki}=\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{m}d_kb_{ki}c_{ki}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{C})$$

即式 (1.10.5) 得证。 ■

定理 1.10.3 令 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 为 $n\times n$ 正方矩阵，并且 $\boldsymbol{1}=[1,1,\cdots,1]^{\mathrm{T}}$ 为 $n\times 1$ 求和向量。假定 $\boldsymbol{M}$ 是一个 $n\times n$ 对角矩阵 $\boldsymbol{M}=\mathrm{diag}(\mu_1,\mu_2,\cdots,\mu_n)$，而 $\boldsymbol{m}=\boldsymbol{M}\boldsymbol{1}$ 为 $n\times 1$ 向量，

则有

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{AMB}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}) = \boldsymbol{m}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})\boldsymbol{m} \tag{1.10.6}$$

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{AB}^{\mathrm{T}}) = \boldsymbol{1}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})\boldsymbol{1} \tag{1.10.7}$$

$$\boldsymbol{MA}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{M} \tag{1.10.8}$$

证明 根据迹的定义，有

$$\operatorname{tr}(\boldsymbol{AMB}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}) = \sum_{i=1}^{n}[\boldsymbol{AMB}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}]_{ii} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}\mu_i\mu_j a_{ij}b_{ij} = \boldsymbol{m}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})\boldsymbol{m}$$

此即式 (1.10.6)。式 (1.10.7) 是式 (1.10.6) 中取 $\boldsymbol{M}=\boldsymbol{I}$ 的特例。直接计算给出

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{MA}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}]_{ij} &= [\boldsymbol{MA}]_{ij}[\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}]_{ij} = (\mu_i a_{ij})(\mu_j b_{ji})\\ &= \mu_i\mu_j[\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}]_{ij} = [\boldsymbol{M}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{M}]_{ij}\end{aligned}$$

式 (1.10.8) 得证。 ■

下面汇总了 Hadamard 积的性质 [296]。

(1) 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 均为 $m\times n$ 矩阵，则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B} &= \boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{A}\\ (\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}} &= \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\\ (\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})^{\mathrm{H}} &= \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\\ (\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})^{*} &= \boldsymbol{A}^{*}\odot\boldsymbol{B}^{*}\end{aligned}$$

(2) 任何一个 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $m\times n$ 零矩阵 $\boldsymbol{O}_{m\times n}$ 的 Hadamard 积等于 $m\times n$ 零矩阵，即 $\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{O}_{m\times n}=\boldsymbol{O}_{m\times n}\odot\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O}_{m\times n}$。

(3) 若 c 为常数，则

$$c\,(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}) = (c\boldsymbol{A})\odot\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}\odot(c\boldsymbol{B})$$

(4) 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times m}=[a_{ij}]$ 与单位矩阵 $\boldsymbol{I}_m$ 的 Hadamard 积为 $m\times m$ 对角矩阵，即

$$\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{I}_m = \boldsymbol{I}_m\odot\boldsymbol{A} = \operatorname{diag}(\boldsymbol{A}) = \operatorname{diag}(a_{11},a_{22},\cdots,a_{mm})$$

(5) 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C},\boldsymbol{D}$ 均为 $m\times n$ 矩阵，则

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\odot(\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C}) &= (\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})\odot\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C}\\ (\boldsymbol{A}\pm\boldsymbol{B})\odot\boldsymbol{C} &= \boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{C}\pm\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C}\\ (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\odot(\boldsymbol{C}+\boldsymbol{D}) &= \boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{C}+\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{D}+\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C}+\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{D}\end{aligned}$$

(6) 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{C}$ 为 $m\times m$ 矩阵，并且 $\boldsymbol{B},\boldsymbol{D}$ 为 $n\times n$ 矩阵，则

$$(\boldsymbol{A}\oplus\boldsymbol{B})\odot(\boldsymbol{C}\oplus\boldsymbol{D}) = (\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{C})\oplus(\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{D})$$

(7) 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 为 $m\times n$ 矩阵，则

$$\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}\odot\boldsymbol{C})\right)=\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\odot\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{C}\right)$$

(8) 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{D}$ 为 $m\times m$ 矩阵，则

$$\boldsymbol{D}\text{为对角矩阵}\quad\Longrightarrow\quad(\boldsymbol{D}\boldsymbol{A})\odot(\boldsymbol{B}\boldsymbol{D})=\boldsymbol{D}(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})\boldsymbol{D}$$

(9) 若 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 是正定 (或半正定) 的，则它们的 Hadamard 积 $\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}$ 也是正定 (或半正定) 的。

现在举一个例子说明 Hadamard 积的应用 [525]。令观测数据模型由

$$\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_k,\qquad k=1,2,\cdots,N \tag{1.10.9}$$

给出，其中，$\boldsymbol{x}_k$ 和 $\boldsymbol{s}_k$ 分别是 k 时刻的 m 维观测向量和 n 维源信号向量，$\boldsymbol{A}$ 是表示信号线性混合状况的矩阵，称为混合矩阵。现在，希望自适应更新权矩阵 $\boldsymbol{W}_k$，使得

$$\boldsymbol{y}_k=\boldsymbol{W}_k\boldsymbol{x}_k \tag{1.10.10}$$

是信号向量 $\boldsymbol{s}_k$ 的估计。这个问题称为盲信号分离问题。

盲信号分离有三种典型的最小均方 (LMS) 型自适应算法：自然梯度算法 [14],[488]，EASI 算法 [73] 和迭代求逆算法 [104]。这三类算法更新权矩阵的公式可以统一写作

$$\boldsymbol{W}_{k+1}=\boldsymbol{W}_k+\eta_k\boldsymbol{G}(\boldsymbol{y}_k)\boldsymbol{W}_k \tag{1.10.11}$$

不同的算法体现在非线性函数 $\boldsymbol{G}(\boldsymbol{y}_k)$ 的选择不同。式中，η_k 称为学习步长或者学习速率，它的选择决定自适应算法的收敛速率和信号跟踪性能。

当学习速率 η_k 固定时，要兼顾收敛速率和信号恢复质量是困难的。因此，η_k 通常取时变函数。最简单的做法是取时间递减函数 [14],[489]，更好的选择是采用自适应的学习速率 [90],[130],[325]，但它们都没有和信号的分离状态或者相依性直接挂钩，效果有限。为了克服这一缺陷，文献 [525] 提出了分阶段学习的盲信号分离算法：

$$\boldsymbol{W}_{k+1}=\boldsymbol{W}_k+\boldsymbol{\Lambda}_k\odot\boldsymbol{G}(\boldsymbol{y}_k)\boldsymbol{W}_k \tag{1.10.12}$$

即使用学习速率矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}_k$ 取代一维的学习速率 η_k。式中，$\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的 Hadamard 积。

整个信号分离过程分为三个阶段，每个阶段使用的学习速率矩阵不同：

(1) 初始阶段：为加速混合信号的分离，对所有信号分量采用大的学习速率 η_k。此时，学习速率矩阵取 $\boldsymbol{\Lambda}_k=\eta_k\boldsymbol{I}$，式 (1.10.12) 的盲信号分离算法取式 (1.10.11) 的形式。

(2) 捕捉阶段：为了捕捉到所有的信号分量，并考虑到有的信号可能已被分离或者被部分分离，因此对所有信号分量采用相同学习速率不再是最优。为了在跟踪已分离信号的同时，加速捕捉未分离的信号，宜对不同的信号采用不同的学习速率：根据分离的程度 (其测度为不同信号之间的二阶和高阶相关系数)，分离程度越好的信号使用越小的学习速率；反之，分离程度越差的信号使用越大的学习速率。具体而言，此阶段取学习速率矩阵 $\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{D}_k$ 为对角矩阵，对角元素对应为不同信号分量的学习速率。此时，盲信号分离算法式 (1.10.12) 简化为

$$\boldsymbol{W}_{k+1} = \boldsymbol{W}_k + \boldsymbol{D}_k\boldsymbol{G}(\boldsymbol{y}_k)\boldsymbol{W}_k \tag{1.10.13}$$

因为 $\boldsymbol{D}_k \odot \boldsymbol{G}(\boldsymbol{y}_k) = \boldsymbol{D}_k\boldsymbol{G}(\boldsymbol{y}_k)$。

(3) 跟踪阶段：一旦捕捉到所有的信号分量，信号分离便进入跟踪阶段。在本阶段，学习速率矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 的各个元素取小的值，盲信号分离算法取式 (1.10.12) 的形式。

分阶段学习的学习速率也可以利用模糊系统理论实现 [286]。

1.10.3 矩阵化函数和向量化函数

矩阵与向量之间存在相互转换的函数。

定义 1.10.3 一个 $mn \times 1$ 向量 $\boldsymbol{a} = [a_1, a_2, \cdots, a_{mn}]^{\mathrm{T}}$ 的矩阵化函数 $\mathrm{unvec}_{m,n}$ 是一个将 mn 个元素的列向量转化为 $m \times n$ 矩阵的算子，即

$$\mathrm{unvec}_{m,n}(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{A}_{m\times n} = \begin{bmatrix} a_1 & a_{m+1} & \cdots & a_{m(n-1)+1} \\ a_2 & a_{m+2} & \cdots & a_{m(n-1)+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_m & a_{2m} & \cdots & a_{mn} \end{bmatrix} \tag{1.10.14}$$

相反，若 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 是一个 $m \times n$ 矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 的向量化函数 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})$ 是一个 $mn \times 1$ 向量，其元素是 $\boldsymbol{A}$ 的元素的字典式排序，即

$$\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}) = \begin{bmatrix} a_{11} \\ \vdots \\ a_{m1} \\ \vdots \\ a_{1n} \\ \vdots \\ a_{mn} \end{bmatrix} \tag{1.10.15}$$

矩阵元素的字典式排序也称按列堆栈 (column stacking)。

根据定义，矩阵化算子和向量化算子有以下关系：

$$\mathrm{unvec}_{m,n}(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{A}_{m\times n} \quad \Longrightarrow \quad \mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_{m\times n}) = \boldsymbol{a} \tag{1.10.16}$$

矩阵也可以按行堆栈 (stack the rows) 为行向量，称为矩阵的行向量化，用符号

rvec($\boldsymbol{A}$) 表示，定义为

$$\text{rvec}(\boldsymbol{A}) = [a_{11}, \cdots, a_{1n}, \cdots, a_{m1}, \cdots, a_{mn}] \tag{1.10.17}$$

注意，矩阵的向量化结果为列向量，行向量化结果为行向量。显然，矩阵的向量化和行向量化之间存在以下关系：

$$\text{rvec}(\boldsymbol{A}) = (\text{vec}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}))^{\mathrm{T}}, \qquad \text{vec}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) = (\text{rvec}(\boldsymbol{A}))^{\mathrm{T}} \tag{1.10.18}$$

对一幅图像进行采样，采样数据组成一矩阵。为了传送图像信号，通常先按行扫描，然后将各行数据串接起来。因此，这是一种典型的行向量化。

根据定义，容易证明矩阵的向量化算子 vec 与迹之间有以下关系：

$$\text{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}) = (\text{vec}(\boldsymbol{A}))^{\mathrm{T}}\text{vec}(\boldsymbol{B}) \tag{1.10.19}$$

$m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的 Hadamard 积的向量化函数为

$$\text{vec}(\boldsymbol{A} \odot \boldsymbol{B}) = \text{vec}(\boldsymbol{A}) \odot \text{vec}(\boldsymbol{B})$$

$$\text{vec}(\boldsymbol{A} \odot \boldsymbol{B}) = \text{diag}(\text{vec}(\boldsymbol{A}))\text{vec}(\boldsymbol{B}) = \text{diag}(\text{vec}(\boldsymbol{B}))\text{vec}(\boldsymbol{A})$$

式中，diag(vec($\boldsymbol{A}$)) 表示用向量化函数 vec($\boldsymbol{A}$) 的各个元素依次为对角元素的对角矩阵。

显然，对于一个 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，向量 vec($\boldsymbol{A}$) 和 vec($\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$) 含有相同的元素，但排列次序不同。因此，存在一个唯一的 $mn \times mn$ 置换矩阵，可以将 vec($\boldsymbol{A}$) 变换为 vec($\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$)。这一置换矩阵称为交换矩阵 (commutation matrix)，记作 $\boldsymbol{K}_{mn}$，即其满足

$$\boldsymbol{K}_{mn}\text{vec}(\boldsymbol{A}) = \text{vec}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) \tag{1.10.20}$$

容易验证交换矩阵具有以下性质：

$$\boldsymbol{K}_{mn}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{K}_{mn}^{-1} = \boldsymbol{K}_{nm} \tag{1.10.21}$$

由于 $\boldsymbol{K}_{mn}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_{mn} = \boldsymbol{K}_{mn}\boldsymbol{K}_{mn}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}_{mn}$，故交换矩阵 $\boldsymbol{K}_{mn}$ 为正交矩阵。

$mn \times mn$ 交换矩阵 $\boldsymbol{K}_{mn}$ 的构造方法如下：每一行只赋一个元素 1，其他元素全部为 0。首先，第 1 行第 1 个元素为 1，然后这个 1 元素右移 m 位，变成第 2 行该位置的 1 元素。第 2 行该位置的 1 元素右移 m 位，又变成第 3 行该位置的 1 元素。依此类推，找到下一行 1 元素的位置。但是，如果向右移位时超过第 mn 列，则应该转到下一行继续移位，并且多移 1 位，并在此位置赋 1。例如，

$$\boldsymbol{K}_{24} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{K}_{42} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$

因此，交换矩阵 $\boldsymbol{K}_{mn}$ 和 $\boldsymbol{K}_{nm}$ 是唯一确定的。以矩阵 $\boldsymbol{A}_{4\times 2}$ 为例，显然

$$\boldsymbol{K}_{42}\text{vec}(\boldsymbol{A})=\begin{bmatrix}1&0&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&1&0&0&0\\0&1&0&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&1&0&0\\0&0&1&0&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&1&0\\0&0&0&1&0&0&0&0\\0&0&0&0&0&0&0&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_{11}\\a_{21}\\a_{31}\\a_{41}\\a_{12}\\a_{22}\\a_{32}\\a_{42}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a_{11}\\a_{12}\\a_{21}\\a_{22}\\a_{31}\\a_{32}\\a_{41}\\a_{42}\end{bmatrix}=\text{vec}(\boldsymbol{A}^{\text{T}})$$

1.10.4 Kronecker 积

Kronecker 积是表示矩阵特殊乘积的一种简洁数学符号。一个 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和一个 $p\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的 Kronecker 积记作 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$，它是一个 $mp\times nq$ 矩阵。

定义 1.10.4 (右 Kronecker 积) [36] $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $p\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的右 Kronecker 积 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 定义为

$$\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}=[a_{ij}\boldsymbol{B}]=\begin{bmatrix}a_{11}\boldsymbol{B}&a_{12}\boldsymbol{B}&\cdots&a_{1n}\boldsymbol{B}\\a_{21}\boldsymbol{B}&a_{22}\boldsymbol{B}&\cdots&a_{2n}\boldsymbol{B}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\a_{m1}\boldsymbol{B}&a_{m2}\boldsymbol{B}&\cdots&a_{mn}\boldsymbol{B}\end{bmatrix}\tag{1.10.22}$$

定义 1.10.5 (左 Kronecker 积) [191] $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $p\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的左 Kronecker 积 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 定义为

$$[\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}]_{\text{left}}=[\boldsymbol{A}b_{ij}]=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}b_{11}&\boldsymbol{A}b_{12}&\cdots&\boldsymbol{A}b_{1q}\\\boldsymbol{A}b_{21}&\boldsymbol{A}b_{22}&\cdots&\boldsymbol{A}b_{2q}\\\vdots&\vdots&&\vdots\\\boldsymbol{A}b_{p1}&\boldsymbol{A}b_{p2}&\cdots&\boldsymbol{A}b_{pq}\end{bmatrix}\tag{1.10.23}$$

容易看出，如果用右 Kronecker 积的形式书写，则左 Kronecker 积可写成 $[\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}]_{\text{left}}=\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{A}$。由于这一原因，为了避免混淆，本书今后将对 Kronecker 积采用右 Kronecker 积的定义，除非另有申明。

Kronecker 积也称直积 (direct product) 或者张量积 (tensor product) [290]。

若矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}=\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\text{T}}$，则

$$\text{vec}(\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\text{T}})=\boldsymbol{b}\otimes\boldsymbol{a}\tag{1.10.24}$$

如下面的定理所述，向量化算子的这一性质公式可以推广为矩阵乘积的向量化公式。

定理 1.10.4 [296] 令 $\boldsymbol{A}_{m\times p}$，$\boldsymbol{B}_{p\times q}$，$\boldsymbol{C}_{q\times n}$，则

$$\text{vec}(\boldsymbol{ABC})=(\boldsymbol{C}^{\text{T}}\otimes\boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{B})\tag{1.10.25}$$

证明 令 $\boldsymbol{B}=[\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_q]$，并且 $\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\cdots,\boldsymbol{e}_q$ 是 $p\times 1$ 基本向量，即

$$\boldsymbol{B}=\sum_{i=1}^{q}\boldsymbol{b}_i\boldsymbol{e}_i^{\text{T}}$$

于是，由式 (1.10.24) 易知

$$\begin{aligned}\text{vec}(\boldsymbol{ABC}) &= \text{vec}\left(\sum_{i=1}^{q} \boldsymbol{A}\boldsymbol{b}_i\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\right) = \sum_{i=1}^{q} \text{vec}\left((\boldsymbol{A}\boldsymbol{b}_i)(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_i)^{\mathrm{T}}\right) \\ &= \sum_{i=1}^{q}(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{A}\boldsymbol{b}_i) = (\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{A})\sum_{i=1}^{q}(\boldsymbol{e}_i \otimes \boldsymbol{b}_i) \\ &= (\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{A})\sum_{i=1}^{q} \text{vec}(\boldsymbol{b}_i\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{T}}) = (\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{B})\end{aligned}$$

本定理得证。 ■

下面是定理 1.10.4 的两个特例。

(1) 若 $\boldsymbol{A}$ 为单位矩阵 $\boldsymbol{I}_m$，而 $\boldsymbol{B} \in R^{m\times q}, \boldsymbol{C} \in R^{q\times n}$，则

$$\text{vec}(\boldsymbol{BC}) = (\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{I}_m)\text{vec}(\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{B})\text{vec}(\boldsymbol{I}_q) = (\boldsymbol{I}_n \otimes \boldsymbol{B})\text{vec}(\boldsymbol{C}) \tag{1.10.26}$$

(2) 若 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{d}$ 为 q 向量，则

$$\boldsymbol{ABd} = \text{vec}(\boldsymbol{ABd}) = (\boldsymbol{d}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{d}^{\mathrm{T}})\text{vec}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}) \tag{1.10.27}$$

Kronecker 积具有以下性质。

(1) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{B}_{p\times q}$，一般有 $\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B} \neq \boldsymbol{B} \otimes \boldsymbol{A}$。

(2) 任意矩阵与零矩阵的 Kronecker 积等于零矩阵，即 $\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{O} = \boldsymbol{O} \otimes \boldsymbol{A} = \boldsymbol{O}$。

(3) 若 α 和 β 为常数，则

$$\alpha\boldsymbol{A} \otimes \beta\boldsymbol{B} = \alpha\beta(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B}) \tag{1.10.28}$$

(4) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{n\times k}, \boldsymbol{C}_{l\times p}, \boldsymbol{D}_{p\times q}$，有

$$\boldsymbol{AB} \otimes \boldsymbol{CD} = (\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{C})(\boldsymbol{B} \otimes \boldsymbol{D}) \tag{1.10.29}$$

(5) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{p\times q}, \boldsymbol{C}_{p\times q}$，有

$$\boldsymbol{A} \oplus (\boldsymbol{B} \pm \boldsymbol{C}) = \boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B} \pm \boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{C} \tag{1.10.30}$$

$$(\boldsymbol{B} \pm \boldsymbol{C}) \otimes \boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} \otimes \boldsymbol{A} \pm \boldsymbol{C} \otimes \boldsymbol{A} \tag{1.10.31}$$

(6) 若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别有广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 和 $\boldsymbol{B}^{\dagger}$，则

$$(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})^{\dagger} = \boldsymbol{A}^{\dagger} \otimes \boldsymbol{B}^{\dagger} \tag{1.10.32}$$

特别地，若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是可逆的正方矩阵，则

$$(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})^{-1} = \boldsymbol{A}^{-1} \otimes \boldsymbol{B}^{-1} \tag{1.10.33}$$

(7) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{p\times q}$，有

$$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} \tag{1.10.34}$$

$$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\otimes\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} \tag{1.10.35}$$

(8) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{p\times q}$，有

$$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})\mathrm{rank}(\boldsymbol{B}) \tag{1.10.36}$$

(9) 若 $\boldsymbol{A}$ 是 $m\times m$ 矩阵，$\boldsymbol{B}$ 是 $n\times n$ 矩阵，则

$$\det(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}) = (\det(\boldsymbol{A}))^n(\det(\boldsymbol{B}))^m \tag{1.10.37}$$

(10) 若 $\boldsymbol{A}$ 是 $m\times m$ 矩阵，$\boldsymbol{B}$ 是 $n\times n$ 矩阵，则

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A})\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}) \tag{1.10.38}$$

(11) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{m\times n}, \boldsymbol{C}_{p\times q}, \boldsymbol{D}_{p\times q}$，有

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\otimes(\boldsymbol{C}+\boldsymbol{D}) = \boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{C}+\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{D}+\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}+\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{D} \tag{1.10.39}$$

更一般地，有

$$\left[\sum_{i=1}^{M}\boldsymbol{A}(i)\right]\otimes\left[\sum_{j=1}^{N}\boldsymbol{B}(j)\right] = \sum_{i=1}^{M}\sum_{j=1}^{N}[\boldsymbol{A}(i)\otimes\boldsymbol{B}(j)] \tag{1.10.40}$$

(12) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{k\times l}, \boldsymbol{C}_{p\times q}, \boldsymbol{D}_{r\times s}$，有

$$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})\otimes(\boldsymbol{C}\otimes\boldsymbol{D}) = \boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}\otimes\boldsymbol{D} \tag{1.10.41}$$

(13) 若 $\boldsymbol{\alpha}_i$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ_i 对应的特征向量，$\boldsymbol{\beta}_i$ 是矩阵 $\boldsymbol{B}$ 与特征值 μ_i 对应的特征向量，则 $\boldsymbol{\alpha}_i\otimes\boldsymbol{\beta}_i$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 与特征值 $\lambda_i\mu_i$ 对应的特征向量，也是与特征值 $\lambda_i+\mu_i$ 对应的特征向量。

(14) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{p\times q}, \boldsymbol{C}_{k\times l}$，有

$$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})\otimes\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}\otimes(\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}) \tag{1.10.42}$$

即 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}$ 的结果是无模糊的 (unambiguous)。

(15) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{p\times q}, \boldsymbol{C}_{n\times r}, \boldsymbol{D}_{q\times s}$，有

$$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})(\boldsymbol{C}\otimes\boldsymbol{D}) = \boldsymbol{AC}\otimes\boldsymbol{BD} \tag{1.10.43}$$

更一般地，有

$$\prod_{i=1}^{N}[\boldsymbol{A}(i)\otimes\boldsymbol{B}(i)] = \otimes\left[\prod_{i=1}^{N}\boldsymbol{A}(i)\right]\left[\prod_{i=1}^{N}\boldsymbol{B}(i)\right] \tag{1.10.44}$$

和

$$\left[\bigotimes_{i=1}^{N}\boldsymbol{A}(i)\right]\left[\bigotimes_{i=1}^{N}\boldsymbol{B}(i)\right] = \bigotimes_{i=1}^{N}\boldsymbol{A}(i)\boldsymbol{B}(i) \tag{1.10.45}$$

(16) 对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n},\boldsymbol{B}_{p\times q}$，有

$$\exp(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})=\exp(\boldsymbol{A})\otimes\exp(\boldsymbol{B}) \tag{1.10.46}$$

(17) 作为式 (1.10.43) 的特例，若 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}_p$ 和 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{I}_q$，则

$$\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{D}=(\boldsymbol{A}\boldsymbol{I}_p)\otimes(\boldsymbol{I}_q\boldsymbol{D})=(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{I}_q)(\boldsymbol{I}_p\otimes\boldsymbol{D}) \tag{1.10.47}$$

式中，$\boldsymbol{I}_p\otimes\boldsymbol{D}$ 为块对角矩阵 (对右 Kronecker 积) 或稀疏矩阵 (对左 Kronecker 积)，而 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{I}_q$ 为稀疏矩阵 (对右 Kronecker 积) 或块对角矩阵 (对左 Kronecker 积)。

上述性质 (1) ~ 性质 (6) 引自文献 [383]，性质 (16) 和性质 (17) 引自文献 [36], [191]，其他性质汇总自文献 [60]。

为了更方便地表示 Kronecker 积，引入以下符号。

$c[i_1,i_2,\cdots,i_k]$：若 $\boldsymbol{c}$ 是一个具有 p^k 个元素的向量，则 $c[i_1,i_2,\cdots,i_k]$ 表示向量 $\boldsymbol{c}$ 的第 $[(i_1-1)p^{k-1}+(i_2-1)p^{k-2}+\cdots+i_k]$ 个元素，其中，$i_1,i_2,\cdots,i_k=\{1,2,\cdots,p\}$。这样一来，$p^k$ 个元素的向量即可视为一个 k 维阵列。

$\boldsymbol{M}([i_1,i_2,\cdots,i_k],[j_1,j_2,\cdots,j_k])$：若 $\boldsymbol{M}$ 是一个 $p^k\times p^k$ 矩阵，则用 $\boldsymbol{M}([i_1,i_2,\cdots,i_k],[j_1,j_2,\cdots,j_k])$ 表示矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的第 $[(i_1-1)p^{k-1}+(i_2-1)p^{k-2}+\cdots+i_k,(j_1-1)p^{k-1}+(j_2-1)p^{k-2}+\cdots+j_k]$ 个元素，其中，$i_1,i_2,\cdots,i_k,j_1,j_2,\cdots,j_k=\{1,2,\cdots,p\}$。

例 1.10.1 假定 $p=2$ 和 $k=2$，则

$$\begin{aligned}
c[1,1]&=\boldsymbol{c}\text{的第 }[(1-1)2^{2-1}+1]\text{ 元素}=\boldsymbol{c}\text{的第 1 个元素}\\
c[1,2]&=\boldsymbol{c}\text{的第 }[(1-1)2^{2-1}+2]\text{ 元素}=\boldsymbol{c}\text{的第 2 个元素}\\
c[2,1]&=\boldsymbol{c}\text{的第 }[(2-1)2^{2-1}+1]\text{ 元素}=\boldsymbol{c}\text{的第 3 个元素}\\
c[2,2]&=\boldsymbol{c}\text{的第 }[(2-1)2^{2-1}+2]\text{ 元素}=\boldsymbol{c}\text{的第 4 个元素}
\end{aligned}$$

因此，可以将向量 $\boldsymbol{c}$ 表示为 $\boldsymbol{c}=\text{col}(c[1,1],c[1,2],c[2,1],c[2,2])$。其中，col 表示列向量。类似地，若 $p=2$ 和 $k=3$，则

$$\boldsymbol{c}=\text{col}(c[1,1,1],c[1,1,2],c[1,2,1],c[1,2,2],c[2,1,1],c[2,1,2],c[2,2,1],c[2,2,2])$$

使用以上符号后，$\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 的第 $[(i_1-1)m+i_2,(j_1-1)n+j_2]$ 个元素为 $a(i_1,j_1)b(i_2,j_2)$，其中，$i_1=1,2,\cdots,p$; $j_1=1,2,\cdots,q$; $i_2=1,2,\cdots,m$; $j_2=1,2,\cdots,n$。

例 1.10.2 考查矩阵方程

$$\boldsymbol{LX}+\boldsymbol{XN}=\boldsymbol{Y} \tag{1.10.48}$$

其中，矩阵 $\boldsymbol{X}$ 未知。假定式 (1.10.48) 中的所有矩阵都是 $n\times n$ 矩阵。随机动态系统的稳定性理论和静态分析都可归结为此矩阵方程。由 Kronecker 积的性质 (14) 知

$$(\boldsymbol{I}_n\otimes\boldsymbol{L})+(\boldsymbol{N}^{\text{T}}\otimes\boldsymbol{I}_n)\text{vec}(\boldsymbol{X})=\text{vec}(\boldsymbol{Y})$$

故

$$\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}) = (\boldsymbol{N}^{\mathrm{T}} \oplus \boldsymbol{L})^{-1}\mathrm{vec}(\boldsymbol{Y}) \tag{1.10.49}$$

若 $\boldsymbol{N}^{\mathrm{T}} \oplus \boldsymbol{L}$ 非奇异。由谱表示原理 [498] 和性质 (12) 可得到

$$(\boldsymbol{N}^{\mathrm{T}} \oplus \boldsymbol{L})^{-1} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} \frac{(\boldsymbol{b}_k \otimes \boldsymbol{w}_i)(\boldsymbol{\beta}_k \otimes \boldsymbol{v}_i)^{\mathrm{T}}}{\mu_k + \gamma_i} \tag{1.10.50}$$

其中，$\boldsymbol{b}_k$, $\boldsymbol{w}_i$, $\boldsymbol{\beta}_k$ 和 $\boldsymbol{v}_i$ 分别是 $\boldsymbol{N}^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{N}$ 和 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$ 的特征向量。综合式 (1.10.49)、式 (1.10.50) 以及性质 (3)、性质 (6) 和性质 (14)，即可得出解为

$$\boldsymbol{X} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} \frac{\boldsymbol{w}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} \boldsymbol{Y} \boldsymbol{\beta}_k \boldsymbol{b}_k^{\mathrm{T}}}{\mu_k + \gamma_i} \tag{1.10.51}$$

定义矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Kronecker 平方

$$\boldsymbol{A}^{[2]} = \boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{A} \tag{1.10.52}$$

类似地，可以定义 Kronecker 乘幂 $\boldsymbol{A}^{[k]}$。

有必要指出，除了两个矩阵的 Hadamard 积与 Kronecker 积之外，还有另外一种矩阵的特殊乘积。

如果 $\boldsymbol{G}$ 是 $t \times u$ 矩阵，而 $\boldsymbol{F}$ 是 $q \times u$ 矩阵，即 $\boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{F}$ 有相同的列数，则这两个矩阵的 Khatri-Rao 积记为 $\boldsymbol{F} * \boldsymbol{G}$，并定义为 [252],[382]

$$\boldsymbol{F} * \boldsymbol{G} = [\boldsymbol{f}_1 \otimes \boldsymbol{g}_1, \boldsymbol{f}_2 \otimes \boldsymbol{g}_2, \cdots, \boldsymbol{f}_u \otimes \boldsymbol{g}_u] \tag{1.10.53}$$

定义 1.10.6 [386] 给定 N 个 $m \times r$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_i, i = 1, 2, \cdots, N$，它们组成矩阵组 $\{\boldsymbol{A}\}_N$。该矩阵组与 $N \times l$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的 Kronecker 积称为广义 Kronecker 积，定义为

$$\{\boldsymbol{A}\}_N \otimes \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1 \otimes \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{A}_2 \otimes \boldsymbol{b}_2 \\ \vdots \\ \boldsymbol{A}_N \otimes \boldsymbol{b}_N \end{bmatrix} \tag{1.10.54}$$

式中，$\boldsymbol{b}_i$ 是矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的第 i 个行向量。

与两个矩阵的 Kronecker 积不同，广义 Kronecker 积是多个矩阵组成的矩阵组与另一个矩阵的 Kronecker 积。

显然，若每一个矩阵 $\boldsymbol{A}_i$ 相同，则广义 Kronecker 积简化为一般的左 Kronecker 积。

例 1.10.3 令

$$\{\boldsymbol{A}\}_2 = \left\{ \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \atop \begin{bmatrix} 2 & -\mathrm{j} \\ 1 & \mathrm{j} \end{bmatrix} \right\}, \qquad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & -1 \end{bmatrix}$$

则广义 Kronecker 积为

$$\{A\}_2 \otimes B = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 2 & -1 \end{bmatrix} \otimes [1, 2] \\ \begin{bmatrix} 2 & -\mathrm{j} \\ 1 & \mathrm{j} \end{bmatrix} \otimes [1, -1] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 & 2 \\ 2 & -1 & 4 & -2 \\ 2 & -\mathrm{j} & -2 & \mathrm{j} \\ 1 & \mathrm{j} & -1 & -\mathrm{j} \end{bmatrix}$$

下面是广义 Kronecker 积的性质 [386]。

(1) 若 $\{A\}$ 的每一个矩阵为 $m_1 \times n_1$ 矩阵，$\{B\}$ 的每一个矩阵为 $m_2 \times n_2$ 矩阵，并且 $\{C\}$ 的每一个矩阵为 $m_3 \times n_3$ 矩阵，则

$$(\{A\} \otimes \{B\}) \otimes \{C\} = \{A\} \otimes (\{B\} \otimes \{C\})$$

(2) 广义 Kronecker 积与矩阵直和之间存在以下关系：

$$\{A\}_N \otimes I_N = \bigoplus_{i=1}^{N} A_i$$

(3) 若

$$\{A\}E = \begin{bmatrix} A_1 E \\ A_2 E \\ \vdots \\ A_N E \end{bmatrix}$$

则

$$(\{A\}E) \otimes (\{B\}F) = (\{A\} \otimes \{B\})(E \otimes F)$$

(4) 令 $\{A^{(0)}\}, \{A^{(1)}\}, \cdots, \{A^{(p-1)}\}$ 为 p 个矩阵组，并且第 k 个矩阵组有 $N_k = m^k$ 个矩阵，即 $\{A^{(k)}\}_{N_k}$。定义

$$R = \{A^{(p-1)}\}_{m^{p-1}} \otimes \{A^{(p-2)}\}_{m^{p-2}} \otimes \{A^{(1)}\}_m \otimes A^{(0)}$$

则矩阵 R 具有稀疏矩阵分解形式

$$R = \prod_{k=0}^{p-1} \left[\bigoplus_{i=0}^{m^{p-k-1}-1} \left(I_{n^k} \otimes A_i^{(p-k-1)} \right) \right]$$

(5) 若每一个矩阵 $A_i^{(k)}$ 为酉 (或者仿酉) 矩阵，则 R 是酉 (或者仿酉) 矩阵。

(6) 若 $m = n$，使得 $A_i^{(k)}, i = 0, 1, \cdots, m^k - 1, k = 0, 1, \cdots, p-1$ 均为正方矩阵，则

$$\det(R) = \prod_{k=0}^{p-1} \prod_{i=0}^{m^k-1} [\det(A_i^{(k)})]^{m^k}$$

广义 Kronecker 积在滤波器组的分析、Haar 变换和 Hadamard 变换的快速算法的推导中有着重要的应用。对这些应用有兴趣的读者可以参考文献 [386]。

下面是向量化函数、Kronecker 乘幂和 Khatri-Rao 积的性质 [36]。

(1) 矩阵之和的向量化

$$\text{vec}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) = \text{vec}(\boldsymbol{A}) + \text{vec}(\boldsymbol{B}) \tag{1.10.55}$$

(2) 转置矩阵的向量化

$$\text{vec}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) = \boldsymbol{K}_{pq}\text{vec}(\boldsymbol{A}) \tag{1.10.56}$$

(3) 两个矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{n\times p}$ 的向量化

$$\begin{aligned}\text{vec}(\boldsymbol{AB}) &= (\boldsymbol{I}_s \otimes \boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{B}) = (\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{I}_p)\text{vec}(\boldsymbol{A}) \\ &= (\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{I}_q)\end{aligned} \tag{1.10.57}$$

(4) 三个矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{n\times p}, \boldsymbol{C}_{p\times q}$ 的向量化 [296, p.30]

$$\text{vec}(\boldsymbol{ABC}) = (\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{B}) \tag{1.10.58}$$

(5) 矩阵的 Kronecker 乘幂

$$\boldsymbol{A}^{[k+1]} = \boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{A}^{[k]} \tag{1.10.59}$$

(6) 矩阵乘积的 Kronecker 乘幂

$$(\boldsymbol{AB})^{[k]} = \boldsymbol{A}^{[k]}\boldsymbol{B}^{[k]} \tag{1.10.60}$$

(7) 三个矩阵乘积的迹

$$\text{tr}(\boldsymbol{ABC}) = (\text{vec}(\boldsymbol{A}))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}_p \otimes \boldsymbol{B})\text{vec}(\boldsymbol{C}) \tag{1.10.61}$$

(8) 四个矩阵乘积的迹 [296, p.31]

$$\text{tr}(\boldsymbol{ABCD}) = (\text{vec}(\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{B}) \tag{1.10.62}$$

$$= (\text{vec}(\boldsymbol{D}))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{C}^{T})\text{vec}(\boldsymbol{B}^{T}) \tag{1.10.63}$$

(9) 矩阵内积的迹等于两个矩阵的向量化函数的内积，即

$$\text{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}) = (\text{vec}(\boldsymbol{A}))^{\mathrm{T}}\text{vec}(\boldsymbol{D}) \tag{1.10.64}$$

(10) Khatri-Rao 积的结合律

$$\boldsymbol{A} * (\boldsymbol{D} * \boldsymbol{F}) = (\boldsymbol{A} * \boldsymbol{D}) * \boldsymbol{F} \tag{1.10.65}$$

(11) Khatri-Rao 积 $\boldsymbol{A} * \boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{B} * \boldsymbol{A}$ 之间的关系

$$\boldsymbol{A} * \boldsymbol{B} = \boldsymbol{K}_{nn}(\boldsymbol{B} * \boldsymbol{A}) \tag{1.10.66}$$

(12) Kronecker 积与 Khatri-Rao 积的乘积

$$(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})(\boldsymbol{F} * \boldsymbol{G}) = \boldsymbol{AF} * \boldsymbol{BG} \tag{1.10.67}$$

式 (1.10.56) 和式 (1.10.66) 中的矩阵 $\boldsymbol{K}_{pq}$ 为交换矩阵。

1.10.5 Kronecker 积的应用

Andrews 与 Kane 证明 [17]，Kronecker 积表示可以导致多种离散酉变换的有效计算机实现，并且 Kronecker 积可以利用矩阵分解定义。文献 [18] 介绍了 Kronecker 积在广义谱分析中的应用。Fino 与 Algazi 证明 [155]，一大类离散酉变换都可以利用广义 Kronecker 积 (具有矩阵置换即元素重排) 的递推公式产生。另外，Kronecker 积还可用于快速酉变换的设计 [469]，数理统计 [191]，线性系统理论 [60]，信号处理与系统理论中的随机静态分析、随机向量和随机向量过程分析 [437]，滤波器组和 Hadamard 变换的分析 [386] 等。

Kronecker 积最直接的应用是求解矩阵方程组

$$\boldsymbol{AXB}=\boldsymbol{C} \tag{1.10.68}$$

式中，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{X}$ 分别是 $m\times n$ 和 $n\times p$ 矩阵，而 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 的维数分别是 $p\times q$ 和 $m\times q$。

利用向量化算符，定义 $\boldsymbol{x}=\mathrm{vec}(\boldsymbol{X})$ 和 $\boldsymbol{c}=\mathrm{vec}(\boldsymbol{C})$，则方程组 (1.10.68) 可以用矩阵的 Kronecker 积改写为 [383]

$$(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{c} \tag{1.10.69}$$

一旦解向量 $\boldsymbol{x}$ 通过式 (1.10.69) 求出后，即可利用向量 $\boldsymbol{x}$ 的矩阵化算符得到原矩阵方程组 (1.10.68) 的解矩阵 $\boldsymbol{X}=\mathrm{unvec}(\boldsymbol{x})$。

Kronecker 积最具有代表性的应用莫过于在信号处理与系统理论中的多变元时间序列的高阶统计量理论与方法中的应用。可以这样说，Kronecker 积乃是多变元时间序列的高阶统计量分析的基本数学工具之一。正是由于 Kronecker 积的使用，才使得多变元时间序列的高阶累积量、高阶谱 (多谱) 和描述输入、输出与多信道系统冲激响应三者关系的数学公式变得非常的简洁，直观上与单变元情况下的对应表示极其相似。

1. 向量过程的累积量

考查观测过程 $\boldsymbol{y}(n)$，它是一个 p 维随机向量，即 $\boldsymbol{y}(n)=[y_1(n),y_2(n),\cdots,y_p(n)]^{\mathrm{T}}$。随机向量的累积量 (cumulants) 有两种不同的定义选择。

一种方式模仿概率论中的第二特征函数 (又叫累积量生成函数,) 定义。令向量 $\boldsymbol{\omega}_i=[\omega_{i1},\omega_{i2},\cdots,\omega_{ip}]^{\mathrm{T}},i=1,2,\cdots,k$ 和 $\boldsymbol{y}=[\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(n),\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(n+\tau_1),\cdots,\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(n+\tau_{k-1})]$ (现在 $\boldsymbol{\omega}_i$ 和 $\boldsymbol{y}$ 均为 pk 维向量)，并产生累积量生成函数 $\ln\mathrm{E}\{\exp(\mathrm{j}\boldsymbol{\omega}_i\boldsymbol{y})\}$，再用该生成函数的 Taylor 级数展开系数定义随机向量 $\boldsymbol{y}$ 的高阶累积量。但是，这种定义最后的表达式太复杂，并且难于推导出其他很多有用的公式。

与上述定义方式不同，另外一种定义具有很多明显的优点。这种方式定义向量元素的互累积量，例如

$$c_{y_i,y_j,y_l}(n;\tau_1,\tau_2)=\mathrm{E}\{y_i(n)y_j(n+\tau_1)y_l(n+\tau_2)\}$$

是 $y_i(n),y_j(n)$ 和 $y_l(n)$ 的三阶累积量。这样一种定义能更加方便地表示随机向量的 k 阶累积量，也有利于累积量之间的运算。下面介绍这种定义。

定义 1.10.7 [437] 假定随机向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_k$ 分别具有 p 个元素，$\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_k$ 的累积量 $\text{cum}(\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_k)$ 是一个有 p^k 个元素的向量，其第 $[i_1,i_2,\cdots,i_k]$ 个元素为互累积量 $\text{cum}(x_{1,i_1},x_{2,i_2},\cdots,x_{k,i_k})$，其中，$i_1,i_2,\cdots,i_k\in\{1,2,\cdots,p\}$。特别地，随机向量 $\boldsymbol{y}(n)$ 的 k 阶累积量定义为

$$c_{ky}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1})=\text{cum}[\boldsymbol{y}(n),\boldsymbol{y}(n+\tau_1),\cdots,\boldsymbol{y}(n+\tau_{k-1})] \tag{1.10.70}$$

其第 $[i_0,i_1,\cdots,i_{k-1}]$ 个元素为 $\text{cum}[y_{i_0}(n),y_{i_1}(n+\tau_1),\cdots,y_{i_{k-1}}(n+\tau_{k-1})]$，其中，$i_0,i_1,\cdots,i_{k-1}\in\{1,2,\cdots,p\}$。

将累积量表示为 p^k 个元素的向量而不是 k 维阵列有两个主要原因：

(1) 它使得我们在运算中能够使用向量和矩阵代数。

(2) 它使得我们能够使用 Kronecker 积的代数运算得到向量过程的相当直观的累积量公式。

业已证明 [437]，一个零均值的 p 元素非平稳向量过程 $\boldsymbol{y}(n)$ 的 k 阶累积量由 p^k 个元素的向量 $\boldsymbol{c}_{ky}$ 给出：

$$c_{2y}(n;\tau)=\text{E}\{\boldsymbol{y}(n)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau)\} \tag{1.10.71}$$

$$c_{3y}(n;\tau_1,\tau_2)=\text{E}\{\boldsymbol{y}(n)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_1)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_2)\} \tag{1.10.72}$$

$$\begin{aligned}c_{4y}(n;\tau_1,\tau_2,\tau_3)=&\text{E}\{\boldsymbol{y}(n)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_1)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_2)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_3)\}-\\&\text{E}\{\boldsymbol{y}(n)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_1)\}\otimes\text{E}\{\boldsymbol{y}(n+\tau_2)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_3)\}-\\&\boldsymbol{P}_p^{\text{T}}\text{E}\{\boldsymbol{y}(n)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_2)\}\otimes\text{E}\{\boldsymbol{y}(n+\tau_3)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_1)\}-\\&\boldsymbol{P}_p\text{E}\{\boldsymbol{y}(n)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_3)\}\otimes\text{E}\{\boldsymbol{y}(n+\tau_1)\otimes\boldsymbol{y}(n+\tau_2)\}\end{aligned} \tag{1.10.73}$$

其中，$\boldsymbol{P}_p$ 是一个 $p^4\times p^4$ 置换矩阵，定义为 $\boldsymbol{P}_p=\boldsymbol{I}\otimes\boldsymbol{U}_{p^2\times p}$。这里，$\boldsymbol{U}_{p^2\times p}$ 是一个 $p^3\times p^3$ 置换矩阵，它的第 $[(i-1)p+k,(k-1)p^2+i]$ 个元素等于 1 (其中，$i=1,2,\cdots,p^2$, $k=1,2,\cdots,p$)，而其他元素均等于零。

若 $y(n)$ 为标量随机过程，则只要将上述累积量公式中的 Kronecker 积换成一般的数乘，置换矩阵换成 1 即可。换句话说，向量过程的累积量与标量过程的累积量具有惊人的相似形式。

再以随机向量的累积量的一个重要性质为例。若 $\boldsymbol{A}_i\ (i=1,2,\cdots,k)$ 为 $r\times p$ 常数矩阵，且 $\boldsymbol{x}_i(i=1,2,\cdots,k)$ 为 $p\times 1$ 随机向量，则

$$\text{cum}(\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{A}_k\boldsymbol{x}_k)=[\boldsymbol{A}_1\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{A}_k]\text{cum}(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_k) \tag{1.10.74}$$

证明 令 $\boldsymbol{y}_i=\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{x}_i(i=1,2,\cdots,k)$，矩阵 $\boldsymbol{A}_i$ 的第 (j,l) 个元素为 $\lambda_{i;j,l}$。于是，由标

量随机过程的累积量性质，有

$$
\begin{aligned}
\text{cum}(\boldsymbol{y}_1,\cdots,\boldsymbol{y}_k)[i_1,\cdots,i_k] &= \text{cum}(y_{1,i_1},\cdots,y_{k,i_k}) \\
&= \text{cum}\left(\sum_{j_1=1}^{p}\lambda_{1;i_1,j_1}x_{1,j_1},\cdots,\sum_{j_k=1}^{p}\lambda_{k;i_k,j_k}x_{k,j_k}\right) \\
&= \sum_{j_1=1}^{p}\cdots\sum_{j_k=1}^{p}\lambda_{1;i_1,j_1}\cdots\lambda_{k;i_k,j_k}\text{cum}(x_{1,j_1},\cdots,x_{k,j_k}) \qquad (1)
\end{aligned}
$$

根据 Kronecker 积的定义，又可得到式 (1.10.74) 右边的第 $[i_1,i_2,\cdots,i_k]$ 个元素为

$$
\begin{aligned}
&(\boldsymbol{A}_1\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{A}_k)\text{cum}(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_k)[i_1,\cdots,i_k] \\
&= \sum_{j_1=1}^{p}\cdots\sum_{j_k=1}^{p}\lambda_{1;i_1,j_1}\cdots\lambda_{k;i_k,j_k}\text{cum}(\boldsymbol{x}_1,\cdots,\boldsymbol{x}_k)[i_1,\cdots,i_k] \\
&= \sum_{j_1=1}^{p}\cdots\sum_{j_k=1}^{p}\lambda_{1;i_1,j_1}\cdots\lambda_{k;i_k,j_k}\text{cum}(x_{1,j_1},\cdots,x_{k,j_k}) \qquad (2)
\end{aligned}
$$

比较式 (1) 和式 (2) 立即可知，两式完全相同，故式 (1.10.74) 为真。 ■

假设多输入 - 多输出 (MIMO) 系统可以用下面的状态空间描述：

$$
\boldsymbol{x}(n+1) = \boldsymbol{\Phi}(n)\boldsymbol{x}(n) + \boldsymbol{B}(n)\boldsymbol{e}(n) \qquad (1.10.75)
$$

$$
\boldsymbol{y}(n) = \boldsymbol{\Psi}(n)\boldsymbol{x}(n) + \boldsymbol{v}(n) \qquad (1.10.76)
$$

则状态过程 $\boldsymbol{x}(n)$ 的累积量向量 $\boldsymbol{c}_{kx}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1})$ 可以递推计算，而且输出过程向量 $\boldsymbol{y}(n)$ 的累积量向量 $\boldsymbol{c}_{ky}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1})$ 与状态过程的累积量向量之间有下列关系：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{c}_{ky}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1}) = &[\boldsymbol{\Psi}(n)\otimes\boldsymbol{\Psi}(n+\tau_1)\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{\Psi}(n+\tau_{k-1})]\times \\
&\boldsymbol{c}_{kx}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1}) + \boldsymbol{c}_{kc}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1}) \qquad (1.10.77)
\end{aligned}
$$

对以上递推公式的建立和式 (1.10.77) 的证明感兴趣的读者可参阅文献 [437]。

2. 多信道 BBR 公式

除了使用状态空间模型外，随机向量过程 $\boldsymbol{y}(n)$ 也可视为一个线性多信道系统的输出，该系统的冲激响应矩阵为 $\boldsymbol{H}(n,k)$，输入为随机向量 $\boldsymbol{e}(n)$。具体地说，$\boldsymbol{y}(n)$ 可表征为

$$
\boldsymbol{y}(n) = \sum_{k=-\infty}^{\infty}\boldsymbol{H}(n,k)\boldsymbol{e}(n) \qquad (1.10.78)
$$

其中，$\boldsymbol{y}(n)\in R^{n_y}$，$\boldsymbol{e}(n)\in R^{n_e}$ 和 $\boldsymbol{H}(n,k)\in R^{n_y}\times R^{n_e}$，且 $X\times Y$ 表示非空集合 X 与 Y 的积集合，即 $X\times Y=\{(x,y):x\in X,y\in Y\}$。

假定 $\boldsymbol{e}(n)$ 与 $\boldsymbol{e}(m),n\neq m$ 独立，即其累积量为多维 Kronecker δ 函数：

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{c}_{ke}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1}) &= \text{cum}\{\boldsymbol{e}(n),\boldsymbol{e}(n+\tau_1),\cdots,\boldsymbol{e}(n+\tau_{k-1})\} \\
&= \boldsymbol{\gamma}_{ke}(n)\delta(\tau_1)\cdots\delta(\tau_{k-1}) \qquad (1.10.79)
\end{aligned}
$$

式中，输入累积量 $\boldsymbol{\gamma}_{ke}(n)$ 是一个有 n_e^k 元素的向量。

描述多信道系统 $\boldsymbol{H}(n,k)$ 与它的输入累积量、输出累积量三者之间关系的数学式称为多信道 Bartlett-Brillinger-Rosenblatt (BBR) 公式。

令 $\tau_0=0$，则

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{c}_{ky}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1})
&=\mathrm{cum}\{\boldsymbol{y}(n),\boldsymbol{y}(n+\tau_1),\cdots,\boldsymbol{y}(n+\tau_{k-1})\}\\
&=\mathrm{cum}\left\{\sum_{t_0}\boldsymbol{H}(n+\tau_0,t_0)\boldsymbol{e}(t_0),\cdots,\sum_{t_{k-1}}\boldsymbol{H}(n+\tau_{k-1},t_{k-1})\boldsymbol{e}(t_{k-1})\right\}\\
&=\sum_{t_0}\cdots\sum_{t_{k-1}}\mathrm{cum}\{\boldsymbol{H}(n+\tau_0,t_0)\boldsymbol{e}(t_0),\cdots,\boldsymbol{H}(n+\tau_{k-1},t_{k-1})\boldsymbol{e}(t_{k-1})\}\\
&=\sum_{t_0}\cdots\sum_{t_{k-1}}[\boldsymbol{H}(n+\tau_0,t_0)\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{H}(n+\tau_{k-1},t_{k-1}]\mathrm{cum}\{\boldsymbol{e}(t_0),\cdots,\boldsymbol{e}(t_{k-1})\}
\end{aligned}$$

利用式 (1.10.79)，上式可进一步简化为

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{c}_{ky}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1})=\sum_{t_0}\cdots\sum_{t_{k-1}}&[\boldsymbol{H}(n+\tau_0,t_0)\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{H}(n+\tau_{k-1},t_{k-1})]\times\\
&\boldsymbol{\gamma}_{ke}\delta(t_0-t_1)\cdots\delta(t_0-t_{k-1})
\end{aligned}\tag{1.10.80}$$

注意到 $\delta(t_0-t_i)=1$ (若 $t_i=t_0$) 和 $\delta(t_0-t_i)=0$ (若 $t_i\neq t_0$)，故式 (1.10.80) 可简化为

$$\boldsymbol{c}_{ky}(n;\tau_1,\cdots,\tau_{k-1})=\sum_{i=-\infty}^{\infty}[\boldsymbol{H}(n,i)\otimes\boldsymbol{H}(n+\tau_1,i)\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{H}(n+\tau_{k-1},i)]\boldsymbol{\gamma}_{ke}(i)\tag{1.10.81}$$

由此得到下面的定理。

定理 1.10.5 (多信道 BBR 公式) 对于由式 (1.10.78) 定义的线性向量过程 $\boldsymbol{y}(n)$，若输入满足式 (1.10.79)，且冲激响应矩阵 $\boldsymbol{H}(n,k)$ 是绝对可和的，即

$$\sum_{n=0}^{\infty}\sum_{k=-\infty}^{\infty}|\boldsymbol{H}(n,k)|<\infty$$

则输出向量过程的 k 阶累积量向量由 BBR 公式 (1.10.81) 给出；并且当系统是时不变即 $\boldsymbol{H}(n,k)=\boldsymbol{H}(n-k)$ 以及 $\boldsymbol{\gamma}_{ke}(n)=\boldsymbol{\gamma}_{ke}$ 时，式 (1.10.81) 简化为

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{c}_{ky}(\tau_1,\cdots,\tau_{k-1})&=\sum_{i=-\infty}^{\infty}[\boldsymbol{H}(i)\otimes\boldsymbol{H}(i+\tau_1)\otimes\cdots\otimes\boldsymbol{H}(i+\tau_{k-1})]\boldsymbol{\gamma}_{ke}\\
&=\sum_{i=-\infty}^{\infty}\left[\bigotimes_{l=0}^{k-1}\boldsymbol{H}(i+\tau_l)\right]\boldsymbol{\gamma}_{ke},\quad \tau_0=0
\end{aligned}\tag{1.10.82}$$

利用 Kronecker 积还容易推导出多信道 ARMA 过程的累积量与多信道 AR 参数之间的线性法方程 —— 多信道修正 Yule-Walker (MYW) 方程，它是辨识多信道 ARMA 模型的关键方程。对这一应用感兴趣的读者可参考文献 [521] 中的第 9 章。

本章小结

本章从线性方程组出发，引出了向量和矩阵的概念，并介绍了向量和矩阵的基本运算。本章的基本内容如下:

(1) 向量的范数、内积、线性相关性、正交性和相似度。

(2) 矩阵的标量函数: 范数、秩、行列式和迹。

(3) 向量子空间的维数、零维和基向量，以及正交基的构造 (Gram-Schmidt 正交化)。

(4) 矩阵的逆矩阵、广义逆矩阵以及线性方程组的求解。

(5) 矩阵的特殊求和与乘积: 直和、直积与 Kronecker 积。

特别地，还重点介绍了求逆矩阵、广义逆矩阵和 Moore-Penrose 逆矩阵的几种具体算法。

围绕向量和矩阵的一些重要概念和定义，本章还依次介绍了以下应用:

(1) 向量的相似度在模式识别的应用 (分类);

(2) 正交向量在移动通信的应用 (多址通信);

(3) 向量范数在自动控制理论中的应用 (作为 Lyapunov 函数);

(4) 正交基在 Fourier 分析和小波分析中的应用;

(5) 广义逆矩阵在二维 ARMA 建模中的应用;

(6) Hadamard 积在盲信号分离中的应用;

(7) Kronecker 积在多信道信号处理中的应用。

习　题

1.1 证明矩阵加法的结合律 $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})+\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}+(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{C})$ 和矩阵乘法的右分配律 $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}$。

1.2 令

$$\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix} 6 & 0 & 0\\ -3 & 4 & 0\\ 0 & 5 & 1\end{bmatrix} \quad \text{和} \quad \boldsymbol{Y}=\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3\\ 0 & -2 & 1\\ 7 & 0 & -1\end{bmatrix}$$

求 $\boldsymbol{X}^2,\boldsymbol{Y}^2,\boldsymbol{XY},\boldsymbol{YX}$，并证明

$$(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{Y})^2=\boldsymbol{X}^2+\boldsymbol{Y}^2-\boldsymbol{XY}-\boldsymbol{YX}=\begin{bmatrix} 52 & -37 & 13\\ -26 & 37 & 1\\ -64 & 44 & 18\end{bmatrix}$$

1.3 假定 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 具有相同的维数，证明

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$$

1.4 令 $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.4 & 0.6\\ 0.2 & 0.8\end{bmatrix}$，计算 $\boldsymbol{A}^2,\boldsymbol{A}^4$ 和 $\boldsymbol{A}^5$。

1.5 已知线性方程组

$$\begin{cases}2y_1-y_2=x_1\\ y_1+2y_2=x_2\\ -2y_1+3y_2=x_3\end{cases},\qquad \begin{cases}3z_1-z_2=y_1\\ 5z_1+2z_2=y_2\end{cases}$$

用 z_1,z_2 表示 x_1,x_2,x_3。

1.6 利用初等行变换，将矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0 & 0 & 2 & 8 & 4\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & 9 & 7\\ 0 & 3 & -11 & -3 & -8 & -15 & -32\\ 0 & -2 & -8 & 1 & 6 & 13 & 21\end{bmatrix}$$

化简为简约阶梯型矩阵。

1.7 利用算法 1.1.2 求解线性方程组

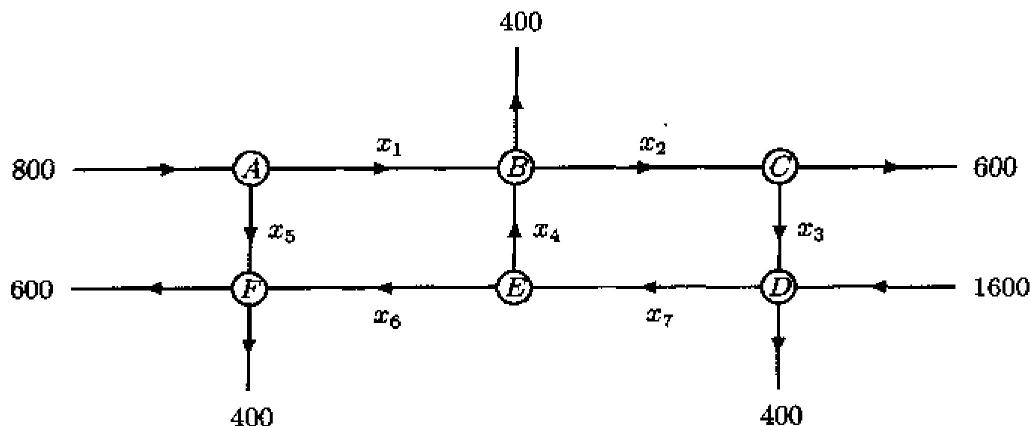
$$\begin{aligned}2x_1-4x_2+3x_3-4x_4-11x_5&=28\\ -x_1+2x_2-\ x_3+2x_4+\ 5x_5&=-13\\ -3x_3+2x_4+5x_5&=-10\\ 3x_1-5x_2+10x_3-7x_4+12x_5&=31\end{aligned}$$

1.8 假定

$$1^3+2^3+\cdots+n^3=a_1n+a_2n^2+a_3n^3+a_4n^4$$

试求常数 a_1,a_2,a_3,a_4。（提示：分别令 $n=1,2,3,4$，得到线性方程组。）

1.9 题 1.9 图画出了某城市 6 个交通枢纽的交通网络图 [240]。其中，节点表示交通枢纽的编号，数字表示在交通高峰期每小时驶入和驶出某个交通枢纽的车辆数。

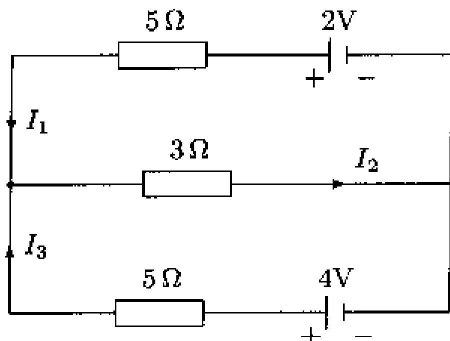


题 1.9 图 交通网络图

(1) 写出表示交通网络图各个交通枢纽的交通流量的线性方程组，并求解该方程组。

(2) 若 $x_6 = 300$ 辆/小时，$x_7 = 1300$ 辆/小时，求交通流量 $x_1 \sim x_5$。

1.10 题 1.10 图画出了一电路，求各个支路的电流。



题 1.10 图 电路图

1.11 证明：由所有 2×2 实矩阵组成的集合是一向量空间，若向量加法定义为矩阵加法，向量与标量的乘法定义为矩阵与标量的乘法。(提示：使用向量空间的定义公式 (1.2.1)。)

1.12 令 $F: R^3 \mapsto R^2$ 是一变换，定义为

$$F(\boldsymbol{x}) = \begin{bmatrix} 2x_1 - x_2 \\ x_2 + 5x_3 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix}$$

试确定 F 是否为线性变换？

1.13 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 3×4 矩阵，证明 $\boldsymbol{A}$ 的列线性相关。

1.14 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 4×3 矩阵，证明 $\boldsymbol{A}$ 的行线性相关。

1.15 令 V 是一 n 维子空间，且 $\boldsymbol{b}$ 为任意 $n\times 1$ 向量。证明：存在 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{v}_0 \in V$，使得

$$\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{v}_0\| \leqslant \|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{v}\| \qquad \forall\, \boldsymbol{v} \in V$$

(提示：令 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_n$ 为子空间 V 的正交基，其中，$\boldsymbol{e}_i$，$i = 1, 2, \cdots, n$ 是仅第 i 个元素为 1，其他元素等于 0 的 $n\times 1$ 向量。)

1.16 [274] 矩阵的秩在工程控制系统的设计起着重要的作用。一个离散时间的控制系统的状态空间模型包括了差分方程

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k + \boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_k, \qquad k = 0, 1, \cdots$$

式中，$\boldsymbol{A} \in R^{n\times n}, \boldsymbol{B} \in R^{n\times m}$，并且 $\boldsymbol{x}_k \in R^n$ 为描述系统在 k 时刻的状态的向量，简称状态向量；而 $\boldsymbol{u}_k$ 为系统在 k 时刻的输入或控制向量。矩阵对 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 称为可控的，若

$$\mathrm{rank}\left([\boldsymbol{B}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}, \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{B}, \cdots, \boldsymbol{A}^{n-1}\boldsymbol{B}]\right) = n$$

且 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 是可控的，则最多用 n 步即可将系统控制到任意一个指定的状态 $\boldsymbol{x}$。试确定以下矩阵对是否可控：

(1) $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.9 & 1 & 0\\ 0 & -0.9 & 0\\ 0 & 0 & 0.5\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}0\\1\\1\end{bmatrix}$

(2) $\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0.8 & -0.3 & 0\\ 0.2 & 0.5 & 1\\ 0 & 0 & -0.5\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}$

1.17 令 U 和 V 是 Euclidean n 空间 R^n 的两个子空间，并假定 V 是 U 的子集。证明 $\dim(V)\leqslant\dim(U)$。若 $\dim(V)=\dim(U)$，证明 U 包含于 V，因此 $V=U$。

1.18 令正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 具有相同的维数，证明 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{AB})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{BA})$。

1.19 解释为什么

(1) $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})$

(2) $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}})$

1.20 令 $\boldsymbol{A}$ 为 $n\times n$ 矩阵，证明：

$$\frac{\partial|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}|}{\partial\lambda}=-\sum_{k=1}^{n}|\boldsymbol{A}_k-\lambda\boldsymbol{I}|$$

式中，$\boldsymbol{A}_k$ 是 $(n-1)\times(n-1)$ 维矩阵，它是从矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中删去第 k 行和第 k 列剩下的子矩阵。

1.21 满足 $|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}|=0$ 的根称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征根。利用上式结果，证明：若 λ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个单特征根，则至少有一个行列式 $|\boldsymbol{A}_k-\lambda\boldsymbol{I}|=0$。

1.22 直线方程可以表示为 $ax+by=-1$。证明一条通过点 (x_1,y_1) 和 (x_2,y_2) 的直线方程为

$$\begin{vmatrix}1 & x & y\\ 1 & x_1 & y_1\\ 1 & x_2 & y_2\end{vmatrix}=0$$

1.23 平面方程可以表示为 $ax+by+cz=-1$。证明：通过三点 (x_i,y_i,z_i), $i=1,2,3$ 的平面方程由

$$\begin{vmatrix}1 & x & y & z\\ 1 & x_1 & y_1 & z_1\\ 1 & x_2 & y_2 & z_2\\ 1 & x_3 & y_3 & z_3\end{vmatrix}=0$$

决定。

1.24 在不展开行列式的情况下，证明下列结果：

$$2\begin{vmatrix}a & b & c\\ d & e & f\\ x & y & z\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}a+b & b+c & c+a\\ d+e & e+f & f+d\\ x+y & y+z & z+x\end{vmatrix}$$

和

$$2\begin{vmatrix}0 & a & b\\ a & 0 & c\\ b & c & 0\end{vmatrix}=\begin{vmatrix}b+a & c & c\\ b & a+c & b\\ a & a & c+b\end{vmatrix}$$

1.25 令 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 正定，并且 $\boldsymbol{B}_{n\times n}$ 半正定，证明

$$\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant\det(\boldsymbol{A})$$

1.26 令 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 和 $\boldsymbol{B}_{n\times n}$ 都是半正定矩阵，证明

$$\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant\det(\boldsymbol{A})+\det(\boldsymbol{B})$$

1.27 令 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 正定，并且 $\boldsymbol{B}_{n\times n}$ 半负定，证明

$$\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\leqslant\det(\boldsymbol{A})$$

1.28 令 $\boldsymbol{A}_{12\times 12}$ 满足 $\boldsymbol{A}^5=3\boldsymbol{A}$。试求 $|\boldsymbol{A}|$ 的所有可能的数值。

1.29 已知 $\boldsymbol{X}=[\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}]$ 是一个分块矩阵，证明

$$|\boldsymbol{X}|^2=|\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}|=\begin{vmatrix}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\end{vmatrix}$$

1.30[411, p.361] 已知 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{M}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$。若矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的秩为 r_X，且 $\boldsymbol{y}$ 是一个正态分布的随机向量，其均值向量为 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}$，协方差矩阵为 $\sigma^2\boldsymbol{I}$，即 $\boldsymbol{y}\sim N(\boldsymbol{X}\boldsymbol{b},\sigma^2\boldsymbol{I})$，证明

(1) $\mathrm{E}\{\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}\}=(n-r_X)\sigma^2$。

(2) $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{M})\boldsymbol{y}$ 是统计独立的随机变量。

(3) $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}/\sigma^2$ 服从自由度为 $(n-r_X)$ 的 $\mathcal{X}^2$ 分布，即 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}/\sigma^2\sim\mathcal{X}^2_{n-r_X}$。

(4) 当 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}$ 时，$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{M})\boldsymbol{y}/\sigma^2\sim\mathcal{X}^2_{r_X}$。

1.31 令 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$，用下面两种方法证明 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=n-\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$：

(1) 利用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的迹与秩相等的性质。

(2) 考虑线性方程组 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 的线性无关解。

1.32 令 $|\boldsymbol{A}+\lambda\boldsymbol{I}|=\lambda^n+a_1\lambda^{n-1}+\cdots+a_{n-1}\lambda+a_n$。证明

$$a_1=-\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}),\quad a_2=-\frac{1}{2}[a_1\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})+\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^2)],\cdots$$

并求用 $a_1,a_2,\cdots,a_{k-1}$ 表示 a_k 的通用递推关系式。

1.33 已知矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & 2\\ -1 & 0 & 2 & -3\\ 2 & 4 & 8 & 5\end{bmatrix}$$

求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩和零维。（提示：将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 化为阶梯型。）

1.34 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，证明 $\text{rank}(\boldsymbol{A})\leqslant m$ 和 $\text{rank}(\boldsymbol{A})\leqslant n$。

1.35 考虑线性方程组

$$\begin{aligned} x_1+3x_2-x_3&=a_1\\ x_1+2x_2&=a_2\\ 3x_1+7x_2-x_3&=a_3 \end{aligned}$$

(1) 确定线性方程组为一致方程的充分必要条件。

(2) 假定三种情况：

① $a_1=2,a_2=2,a_3=6$

② $a_1=1,a_2=0,a_3=-2$

③ $a_1=0,a_2=1,a_3=2$

判断线性方程组是否为一致方程。若是一致方程，则给出相对应的解。

1.36 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 3×4 矩阵，其零维等于 1。证明对 3×1 实向量 $\boldsymbol{b}$ 的每一种选择，3×4 线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 均是一致方程。

1.37 设线性方程组

$$\begin{aligned} x_1+a_1x_2+a_1^2x_3&=a_1^3\\ x_1+a_2x_2+a_2^2x_3&=a_2^3\\ x_1+a_3x_2+a_3^2x_3&=a_3^3\\ x_1+a_4x_2+a_4^2x_3&=a_4^3 \end{aligned}$$

(1) 证明：若 a_1,a_2,a_3,a_4 两两不相等，则该线性方程组无解。

(2) 设 $a_1=a_3=c$ 和 $a_2=a_4=-c$，其中，$c\neq 0$，且已知

$$\boldsymbol{\alpha}_1=\begin{bmatrix}-1\\1\\1\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{\alpha}_2=\begin{bmatrix}1\\1\\-1\end{bmatrix}$$

是线性方程组的两个解，写出此方程组的通解。

1.38 当 λ 取何值时，线性方程组

$$\begin{aligned} (\alpha+3)x_1+x_2+2x_3&=\alpha\\ 3(\alpha+1)x_1+\alpha x_2+(\alpha+3)x_3&=3\\ \alpha x_1+(\alpha-1)x_2+x_3&=\alpha \end{aligned}$$

有唯一解、无解和无穷多解。当方程组有无穷多解时，求出它的通解。

1.39 当 α 和 β 取何值时，线性方程组

$$
\begin{aligned}
x_1 + 3x_2 + 6x_3 + x_4 &= 3 \\
x_1 + x_2 + 2x_3 + 3x_4 &= 1 \\
x_1 - 5x_2 - 10x_3 + 12x_4 &= \alpha \\
3x_1 - x_2 - \beta x_3 + 15x_4 &= 3
\end{aligned}
$$

有唯一解、无解和无穷多解。当方程组有无穷多解时，求出它的通解。

1.40 [411] 已知矩阵方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 为

$$
\begin{aligned}
x_1 + 2x_2 + 3x_3 &= 26 \\
3x_1 + 7x_2 + 10x_3 &= 87 \\
2x_1 + 11x_2 + 7x_3 &= 73
\end{aligned}
$$

(1) 利用高斯消去法求解方程。

(2) 将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 j 列用 $\boldsymbol{b}$ 代替，并记所得矩阵为 $\boldsymbol{A}_j$。证明 (1) 中求出的方程的解可以表示为

$$
x_j = |\boldsymbol{A}_j|/|\boldsymbol{A}|, \quad j = 1, 2, 3
$$

这一方法称为求解线性方程的 Cramer 法则。

(3) 证明对 $\boldsymbol{A}_{n\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1} = \boldsymbol{b}_{n\times 1}$ 的一般情况，若 $|\boldsymbol{A}| \neq 0$，则由 Cramer 法则求出的解 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^{\mathrm{T}}$ 确实满足线性方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$。

1.41 假定 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都是 $n \times n$ 矩阵，并且 $\boldsymbol{A}$ 非奇异。从线性方程组的角度证明：若 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{O}$ (零矩阵)，则 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{O}$。

1.42 设向量组

$$
\boldsymbol{a}_1 = [1, 1, 1, 3]^{\mathrm{T}}, \qquad \boldsymbol{a}_2 = [-1, -3, 5, 1]^{\mathrm{T}}
$$
$$
\boldsymbol{a}_3 = [3, 2, -1, p+2]^{\mathrm{T}}, \qquad \boldsymbol{a}_4 = [-2, -6, 10, p]^{\mathrm{T}}
$$

(1) p 为何值时，此向量组线性无关？用 $\boldsymbol{a}_1 \sim \boldsymbol{a}_4$ 的线性组合表示 $\boldsymbol{a} = [4, 1, 6, 10]^{\mathrm{T}}$。

(2) p 取何值时，该向量组线性相关？求出此时矩阵 $[\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3, \boldsymbol{a}_4]$ 的秩和一个极大线性无关的向量组。

1.43 已知向量组

$$
\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} a \\ 2 \\ 10 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 5 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{a}_3 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 4 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ b \\ c \end{bmatrix}
$$

试分别求出满足以下条件的 a, b, c 值：

(1) $\boldsymbol{b}$ 可由 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \boldsymbol{a}_3$ 线性表示，且唯一。

(2) $\boldsymbol{b}$ 不能由 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$ 线性表示。

(3) $\boldsymbol{b}$ 可由 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3$ 线性表示，但表示不唯一。并求出一般表达式。

1.44 令矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的秩 $r=\text{rank}(\boldsymbol{A})$。证明：若 $\boldsymbol{A}$ 分块为

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{A}_{12}\\ \boldsymbol{A}_{21} & \boldsymbol{A}_{22}\end{bmatrix}$$

式中，$r\times r$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_{11}$ 是一个秩为 r 的非奇异矩阵，则 $\boldsymbol{A}_{22}=\boldsymbol{A}_{21}\boldsymbol{A}_{11}^{-1}\boldsymbol{A}_{12}$。（提示：注意 $[\boldsymbol{A}_{21},\boldsymbol{A}_{22}]$ 的行是 $[\boldsymbol{A}_{11},\boldsymbol{A}_{12}]$ 的 r 行的线性组合，即有 $[\boldsymbol{A}_{21},\boldsymbol{A}_{22}]=\boldsymbol{F}[\boldsymbol{A}_{11},\boldsymbol{A}_{12}]$。类似地，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的右边 $n-r$ 列是左边 r 列的线性组合。）

1.45 令两个向量相互正交，证明它们线性无关。

1.46 矩阵 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{B}$，并且 $\boldsymbol{B}$ 的列是 $\boldsymbol{A}$ 的列的线性组合。证明 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{B}$。

1.47 设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满列秩，$\boldsymbol{T}$ 满行秩。证明：$\boldsymbol{TA}=\boldsymbol{O}$ 意味着 $\boldsymbol{T}$ 的行是 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的行的线性组合。

1.48 验证向量组

$$A=\left\{\begin{bmatrix}1\\0\\1\\2\end{bmatrix},\begin{bmatrix}-1\\1\\1\\0\end{bmatrix},\begin{bmatrix}-1\\-2\\1\\0\end{bmatrix}\right\}$$

是一组正交向量。

1.49 令 $B=\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3\}$ 是 Euclidean 空间 R^3 的一组正交基。给定向量 $\boldsymbol{u}\in R^3$，试确定常数 a_1,a_2,a_3 使得

$$\boldsymbol{u}=a_1\boldsymbol{v}_1+a_2\boldsymbol{v}_2+a_3\boldsymbol{v}_3$$

1.50 使用 Gram-Schmidt 正交化方法构造子空间 $V=\text{Span}\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\boldsymbol{v}_3\}$ 的正交基和标准正交基，其中

$$\boldsymbol{v}_1=\begin{bmatrix}0\\2\\1\\1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{v}_2=\begin{bmatrix}0\\3\\1\\1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{v}_3=\begin{bmatrix}1\\1\\1\\0\end{bmatrix}$$

1.51 已知 3×5 矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 3 & 2 & 5 & 7\\ 2 & 1 & 0 & 6 & 1\\ 1 & 1 & 2 & 5 & 4\end{bmatrix}$$

用 MATLAB 函数 orth(A) 和 null(A) 分别求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间 Span($\boldsymbol{A}$ 的正交基和零空间 Null($\boldsymbol{A}$)。

1.52 令 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 是 Euclidean n 空间 R^n 的任意两个向量，证明 Cauchy-Schwartz 不等式 $|\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}|\leqslant\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|$。（提示：观察 $\|\boldsymbol{x}-c\boldsymbol{y}\|^2\geqslant 0$ 对所有标量 c 成立。）

1.53 令 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 是 Euclidean n 空间 R^n 的任意两个向量，证明三角不等式 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|\leqslant\|\boldsymbol{x}\|+\|\boldsymbol{y}\|$。（提示：展开 $\|\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}\|^2$，并利用 Cauchy-Schwartz 不等式。）

1.54 令 $B=\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_n\}$ 是子空间 W 的正交基，且 $\boldsymbol{u}$ 是子空间 W 内的向量。证明：若 $\boldsymbol{u}=a_1\boldsymbol{v}_1+a_2\boldsymbol{v}_2+\cdots+a_n\boldsymbol{v}_n$，则

$$\|\boldsymbol{u}\|^2=|a_1|^2+|a_2|^2+\cdots+|a_n|^2$$

1.55 证明任意一组由 R^3 中的 4 个或更多个向量的集合不可能组成 R^3 的正交基。

1.56 定义变换 $H:R^2\mapsto R^2$ 为

$$H(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix}x_1+x_2-1\\3x_1\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}$$

判断 H 是否为线性变换。

1.57 令

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}0.5&0.2&0.3\\0.3&0.8&0.3\\0.2&0&0.4\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{x}_0=\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$$

假定一系统的状态向量可以用 Markov 链 $\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}_k,\ k=0,1,\cdots$ 描述。试计算状态向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_{15}$，分析系统随时间的变化。

1.58 已知矩阵函数

$$\boldsymbol{A}(x)=\begin{bmatrix}2x&-1&x&2\\4&x&1&-1\\3&2&x&5\\1&-2&3&x\end{bmatrix}$$

求 $\dfrac{\mathrm{d}^3|\boldsymbol{A}(x)|}{\mathrm{d}x^3}$。（提示：按任意行或列展开行列式 $|\boldsymbol{A}(x)|$，并且只需要关心 x^4 和 x^3 项。）

1.59 证明：若 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则

$$\begin{vmatrix}\boldsymbol{A}_1&\boldsymbol{A}_2\\\boldsymbol{A}_3&\boldsymbol{A}_4\end{vmatrix}=|\boldsymbol{A}_1||\boldsymbol{A}_4-\boldsymbol{A}_3\boldsymbol{A}_1^{-1}\boldsymbol{A}_2|$$

1.60 求矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\neq\boldsymbol{B}$，使得下面的每一个二次型分别可以写成 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$：

(1) $7x_1^2+14x_1+5x_2^2$。

(2) $(x_1-2x_2)^2+(3x_2-x_3)^2+(6x_1-4x_3)^2$。

(3) $2(x_1^2+x_2^2+x_3^2)-2(x_1x_2+x_1x_3+x_2x_3)$。

(4) $a_1x_1^2+a_2x_2^2+a_3x_3^2+b_1x_1x_2+b_2x_1x_3+b_3x_2x_3$。

1.61 判断下列二次型的正定性：

(1) $f=-2x_1^2-8x_2^2-6x_3^2+2x_1x_2+2x_1x_3$。

(2) $f=x_1^2+4x_2^2+9x_3^2+15x_4^2-2x_1x_2+4x_1x_3+2x_1x_4-6x_2x_4-12x_3x_4$。

1.62 证明：

(1) 若 $\boldsymbol{B}$ 为实的非奇异矩阵，则 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$ 正定。

(2) 若 $|C| \neq 0$，则 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}$ 正定。

1.63 证明：若

$$\sum_{i=1}^{n} a_{ii}x_i^2 + \sum_{i=1,i\neq j}^{n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij}|x_i x_j$$

正定，则

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}x_i x_j$$

正定。

1.64 设 $n \times n$ $(n \geqslant 3)$ 矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & a & \cdots & a \\ a & 1 & \cdots & a \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a & a & \cdots & 1 \end{bmatrix}$$

当 a 取何值时，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 $n-1$。

1.65 已知 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA} = \boldsymbol{O}$ (零矩阵) 和 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}^2) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$，证明

(1) $\mathrm{rank}(\boldsymbol{AB}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) + \mathrm{rank}(\boldsymbol{B})$。

(2) $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}^k + \boldsymbol{B}^k) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}^k) + \mathrm{rank}(\boldsymbol{B}^k)$，其中，$k$ 是某个整数。

1.66 令 $\boldsymbol{C}_{n\times n}$ 是一任意对称矩阵，证明：存在满足 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{O}$ 的两个唯一非负定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，使得 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}$。

1.67 已知向量组 $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_p\}$ 中 $\boldsymbol{x}_p \neq \boldsymbol{0}$。令 $a_1, a_2, \cdots, a_{p-1}$ 为任意常数，并且

$$\boldsymbol{y}_i = \boldsymbol{x}_i + a_i\boldsymbol{x}_p, \quad i = 1, 2, \cdots, p-1$$

证明向量组 $\{\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_{p-1}\}$ 线性无关的充要条件是向量组 $\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_p\}$ 线性无关。

1.68 证明：若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}$，则 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{A}^2$。

1.69 [411] 设

$$\boldsymbol{K} = \boldsymbol{K}^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{K}^3, \quad \boldsymbol{K}\mathbf{1} = 0, \qquad \boldsymbol{K}\begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 2 \\ -3 \end{bmatrix}$$

式中，$\mathbf{1}$ 是一个元素全部为 1 的向量。计算下列值，并且说明为什么在无需计算 $\boldsymbol{K}$ 的情况下，可以得到下列值的原因：

(1) $\boldsymbol{K}$ 的阶数。

(2) $\boldsymbol{K}$ 的秩。

(3) $\boldsymbol{K}$ 的迹和行列式。

(4) $\boldsymbol{K}^{26}$ 的迹和行列式。

(5) 矩阵 $6\boldsymbol{K}^{60} - 7\boldsymbol{K}^{37} + 3\boldsymbol{I}$ 的迹与行列式。

1.70 假定下面提到的每个逆矩阵都存在，证明以下结果：

(1) $(\boldsymbol{A}^{-1}+\boldsymbol{I})^{-1}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{I})^{-1}$。

(2) $(\boldsymbol{A}^{-1}+\boldsymbol{B}^{-1})^{-1}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{B}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{A}$。

(3) $(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{AB})^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{BA})^{-1}$。

(4) $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}^{-1}$ 意味着 $\boldsymbol{AB}^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{BA}^{-1}\boldsymbol{B}$。

(5) $\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}-\boldsymbol{B}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}$。

1.71 验证分块矩阵求逆公式 (1.7.18) ~ 公式 (1.7.20)。

1.72 用矩阵求逆公式 (1.7.2) 分别计算矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 3 & 2\\ 5 & 2 & 0\\ 2 & -1 & 1\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}4 & 1 & 3\\ 0 & 2 & 0\\ -4 & 1 & -4\end{bmatrix},$$

的逆矩阵。

1.73 验证分块矩阵的求逆公式

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{U}\\ \boldsymbol{V} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{UD}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1} & -\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{U}(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{VA}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\\ -\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{V}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{UD}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1} & (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{VA}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\end{bmatrix}$$

1.74 验证分块矩阵的求逆公式

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{U}\\ \boldsymbol{V} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}^{-1}=\begin{bmatrix}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{UD}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1} & -(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{UD}^{-1}\boldsymbol{V})^{-1}\boldsymbol{UD}^{-1}\\ -(\boldsymbol{D}-\boldsymbol{VA}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\boldsymbol{VA}^{-1} & (\boldsymbol{D}-\boldsymbol{VA}^{-1}\boldsymbol{U})^{-1}\end{bmatrix}$$

1.75 若 $\boldsymbol{Y}=(\boldsymbol{AX}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{CX}+\boldsymbol{D})^{-1}$，试用 $\boldsymbol{Y}$ 表示 $\boldsymbol{X}$。

1.76 [411, p.362] 当 $\boldsymbol{X}$ 是随机变量的矩阵时，不存在 $\boldsymbol{X}$ 的散布矩阵。与之不同，却存在 $\text{vec}(\boldsymbol{X})$ 的散布矩阵，并且散布矩阵包含矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的所有元素的方差和协方差。令 $\boldsymbol{x}_i$ 和 $\boldsymbol{x}_j$ 是矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的列，它们的协方差矩阵为

$$\text{cov}\left(\boldsymbol{x}_i,\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\right)=\boldsymbol{M}_{ij}$$

于是，向量化函数 $\text{vec}(\boldsymbol{X})$ 的方差 - 协方差矩阵 $\text{var}(\text{vec}(\boldsymbol{X}))$ 是一分块矩阵，其子矩阵为 $\boldsymbol{M}_{ij}$，即有

$$\text{var}(\text{vec}(\boldsymbol{X}))=\{\boldsymbol{M}_{ij}\}$$

对于 $\boldsymbol{M}_{ij}=m_{ij}\boldsymbol{V}$ 的特殊情况，若 $\boldsymbol{M}=\{m_{ij}\}$，证明

(1) $\text{var}(\text{vec}(\boldsymbol{X}))=\boldsymbol{M}\otimes\boldsymbol{V}$。

(2) $\text{var}(\text{vec}(\boldsymbol{TX}))=\boldsymbol{M}\otimes\boldsymbol{TVT}^{\mathrm{T}}$。

(3) $\text{var}(\text{vec}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}))=\boldsymbol{V}\otimes\boldsymbol{M}$。

1.77 证明：

(1) $\mathrm{vec}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}) = \boldsymbol{y} \otimes \boldsymbol{x}$。

(2) $\mathrm{vec}(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{b}) = \mathrm{vec}(\boldsymbol{A}) \otimes \boldsymbol{b}$。

(3) $\mathrm{vec}(\boldsymbol{a}_{p\times 1} \otimes \boldsymbol{B}_{m\times n}) = (\boldsymbol{I}_{p+n} \otimes \boldsymbol{I}_m)(\boldsymbol{a} \otimes \mathrm{vec}(\boldsymbol{B}))$。

(4) $\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_{p\times q} \otimes \boldsymbol{B}_{m\times n}) = (\boldsymbol{I}_q \otimes \boldsymbol{I}_{p+n} \otimes \boldsymbol{I}_m)(\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}) \otimes \mathrm{vec}(\boldsymbol{B}))$。

1.78 证明：

$$\mathrm{vec}(\boldsymbol{PQ}) = (\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{P})\mathrm{vec}(\boldsymbol{I}) = (\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{I})\mathrm{vec}(\boldsymbol{P}) = (\boldsymbol{I} \otimes \boldsymbol{P})\mathrm{vec}(\boldsymbol{Q})$$

1.79 验证 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{XA}) = (\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}))^{\mathrm{T}}\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}) = (\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}))^{\mathrm{T}}\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})$。求 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{XA})$ 关于 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{X})$ 的偏导，证明：

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{X}}\mathrm{tr}(\boldsymbol{XA}) = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$$

1.80 设 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 分别是 $m \times n, n \times m$ 和 $n \times p$ 矩阵。证明：若 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{AH})$，则 $\boldsymbol{GAH} = \boldsymbol{H} \Longrightarrow \boldsymbol{G} = \boldsymbol{A}^{\dagger}$。

1.81 令 $\boldsymbol{I}$ 为 $n\times n$ 单位矩阵，$\boldsymbol{J}_{n\times n}$ 是全部元素等于 1 的矩阵。若 $a+(n-1)b=0$，证明 $(a-b)^{-1}\boldsymbol{I}$ 是矩阵 $(a-b)\boldsymbol{I}+b\boldsymbol{J}$ 的满足定义 $\boldsymbol{AGA} = \boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵。

1.82 一个对角矩阵 $\boldsymbol{H}$ 称为 Hermitian 标准型，若它的对角线元素仅由 0 和 1 组成。对于任意一个正方矩阵 $\boldsymbol{A}$，总是存在非奇异矩阵 $\boldsymbol{C}$ 使得 $\boldsymbol{CA} = \boldsymbol{H}$ 为 Hermitian 标准型。证明 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}^{-}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵。

1.83 令 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{R}_{p\times n}$ 是两个复矩阵，并且 $\boldsymbol{N}_{n\times q}$ 是一满足 $\boldsymbol{RN} = \boldsymbol{O}$ 的任意矩阵，其秩为 $n - \mathrm{rank}(\boldsymbol{R})$，记

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{N}(\boldsymbol{N}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AN})^{-}\boldsymbol{N}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$$
$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} - \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AD}$$

证明

(1) 方程

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{R}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{R} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{X} \\ \boldsymbol{Y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix}$$

是一致方程。

(2) 若

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{R}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{R} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}^{-} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{C}_1 & \boldsymbol{C}_2^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{C}_2 & \boldsymbol{C}_3 \end{bmatrix}$$

则

① $\boldsymbol{C}_2^{\mathrm{H}}$ 是 $\boldsymbol{R}$ 的广义逆矩阵。

② $\boldsymbol{RC}_1\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{O}$。

③ $\boldsymbol{AC}_1\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 为幂等矩阵，即 $(\boldsymbol{AC}_1\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^2 = \boldsymbol{AC}_1\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$。

④ C_1 是矩阵 A^HA 的广义逆矩阵，并且 C_1A^H 是矩阵 A 的广义逆矩阵 [251]。

1.84 令

$$T=\begin{bmatrix}0 & -a_3 & a_2\\ a_3 & 0 & -a_1\\ -a_2 & a_1 & 0\end{bmatrix}$$

证明 $-(a_1^2+a_2^2+a_3^2)^{-1}T$ 是 T 的广义逆矩阵 T^-。

1.85 利用矩阵的满秩分解，求矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1 & 2 & 4 & 3\\ 3 & -1 & 2 & -2\\ 5 & 4 & 0 & -7\end{bmatrix},\qquad B=\begin{bmatrix}1 & 2 & -1\\ 3 & 2 & 1\\ -1 & -2 & -1\\ 3 & 5 & 4\end{bmatrix}$$

的广义逆矩阵 A^- 和 B^-。

1.86 设 $KA=O$ 和 $K^2=K$，证明矩阵 A 的广义逆矩阵 $A^-=(A-K)^{-1}$。

1.87 已知 $K^2=K$，且 Z^- 是矩阵 $Z=KAK$ 的广义逆矩阵。证明：KZ^-K 也是 Z 的一个广义逆矩阵。

1.88 设 G 是 A 的一个广义逆矩阵。证明：它也是矩阵 AG 的一个广义逆矩阵，当且仅当 G^2 是 A 的一个广义逆矩阵。

1.89 满足 Moore-Penrose 逆矩阵两个条件

$$AGA=A,\quad GAG=G$$

的矩阵 G 称为矩阵 A 的自反广义逆矩阵 (reflexive generalized inverse) [411, p.216]。证明：$\text{rank}(G)=\text{rank}(A)$ 对 $AGA=A$ 成立，当且仅当 G 是 A 的一个自反广义逆矩阵。

1.90 令

$$G=Q\begin{bmatrix}I_r & U\\ V & VU\end{bmatrix}P$$

其中，I_r 为单位矩阵，并且

$$PAQ=\begin{bmatrix}I_r & O\\ O & O\end{bmatrix},\quad O\text{ 为零矩阵}$$

证明 G 是 A 的自反广义逆矩阵。

1.91 证明

(1) 所有左和右逆矩阵都是自反广义逆矩阵，它们分别满足 Moore-Penrose 对称条件 $AGA=A$ 和 $GAG=G$ 之中的一个条件。

(2) 一个满行 (列) 秩矩阵 A 的所有广义逆矩阵 A^- 都是右 (左) 逆矩阵。

1.92 求 3×1 向量 $a=[1,5,7]^T$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵和其他两个广义逆矩阵。

1.93 证明 $A(A^TA)^{-2}A^T$ 是 AA^T 的 Moore-Perrose 逆矩阵。

1.94 证明关于 Moore-Penrose 逆矩阵的下列定义条件 (1) 和条件 (2) 等价：

(1) $AGA=A,\quad GAG=G,\quad (AG)^{\#}=AG,\quad (GA)^{\#}=GA$

(2) $A^{\#}AG = A^{\#}$, $G^{\#}GA = G^{\#}$

1.95 设 A 是一对称矩阵，并且 M 是 A 的 Moore-Penrose 逆矩阵。证明：矩阵 M^2 是 A^2 的 Moore-Penrose 逆矩阵。

1.96 已知矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & 2 \\ -1 & 4 & 5 & 3 \end{bmatrix}$$

用 KL 分解法求 Moore-Penrose 逆矩阵 $A^{\dagger}$。

1.97 分别利用递推法 (算法 1.9.3) 和迹方法 (算法 1.9.4) 求矩阵

$$X = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -2 \\ 0 & 1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \end{bmatrix}$$

的 Moore-Penrose 逆矩阵 $X^{\dagger}$。

1.98 验证

$$G = \frac{1}{12}\begin{bmatrix} 5 & -4 & -1 & 3 \\ -2 & 4 & -2 & 6 \\ -3 & 0 & 3 & 3 \end{bmatrix}$$

确实是矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & -1 \\ 0 & -1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

的 Moore-Penrose 逆矩阵。

1.99 证明：若 $Ax = b$ 为一致方程，则其通解为

$$x = A^{\dagger}b + (I - A^{\dagger}A)z$$

式中，$A^{\dagger}$ 是 A 的 Moore-Penrose 逆矩阵，并且 z 为任意向量。

1.100 令矩阵 A 和 B 是使得矩阵乘积 AB 存在，并且 $B_1 = A^{\dagger}AB$ 和 $A_1 = AB_1B_1^{\dagger}$，证明

$$AB = A_1B_1 \quad 和 \quad (AB)^{\dagger} = (A_1B_1)^{\dagger} = B_1^{\dagger}A_1^{\dagger}$$

上述结果是 Cline 建立的 [98]。

1.101 令 U 是 P_3 空间的子空间，定义为

$$U = \{p(x) = a_0 + a_1x + a_2x^2 + a_3x^3 : a_3 = -2a_0 + 3a_1 + a_2\}$$

证明 U 与 P_3 同构。

1.102 证明满足 $(I - A)(I + A) = O$ 的矩阵 A 为对合矩阵。

1.103 设 $A_{n\times n}$ 为对合矩阵，证明 $B = \frac{1}{2}(I + A)$ 为幂等矩阵。

1.104 已知

$$P_{\text{ex}}(n)=\text{tr}\,(\boldsymbol{R}\boldsymbol{\Phi}(n-1))$$

式中，$\boldsymbol{R}=\text{E}\{\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\text{H}}(n)\}$ 是 $M\times 1$ 随机数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 的自相关矩阵，并且

$$\boldsymbol{\Phi}(n)\approx\lambda^2\boldsymbol{\Phi}(n-1)+\sigma^2\text{E}\left\{\hat{\boldsymbol{R}}^{-1}(n)\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\text{H}}(n)\hat{\boldsymbol{R}}^{-1}(n)\right\}$$

其中，$0<\lambda<1$，并且

$$\hat{\boldsymbol{R}}(n)=\sum_{i=0}^{n}\lambda^{n-i}\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\text{H}}(n)$$

是真实自相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的样本估计。证明

$$P_{\text{ex}}(\infty)=\text{tr}\,(\boldsymbol{R}\boldsymbol{\Phi}(\infty))\approx\frac{1-\lambda}{1+\lambda}M\sigma^2$$

(提示：求逆矩阵的数学期望 $\text{E}\{\hat{\boldsymbol{R}}^{-1}\}$ 的近似。)

1.105 证明：对于任何 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，其向量化函数

$$\text{vec}(\boldsymbol{A})=(\boldsymbol{I}_n\otimes\boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{I}_n)=(\boldsymbol{A}^{\text{T}}\boldsymbol{I}_n)\text{vec}(\boldsymbol{I}_m)$$

1.106 证明 $\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B}$ 非奇异的充分必要条件是 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别非奇异，并证明 $(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}\otimes\boldsymbol{B}$。

1.107 证明 Kronecker 积的 Moore-Penrose 逆矩阵的关系 $(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})^{\dagger}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\otimes\boldsymbol{B}^{\dagger}$。

1.108 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 为相同维数的正方矩阵，并且 $\boldsymbol{C}^{\text{T}}=\boldsymbol{C}$，证明

$$(\text{vec}(\boldsymbol{C}))^{\text{T}}(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{B})\text{vec}(\boldsymbol{C})=(\text{vec}(\boldsymbol{C}))^{\text{T}}(\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{C})$$

1.109 令 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 具有适当的维数，使得 $\boldsymbol{ABCD}$ 满足矩阵乘积定义。证明

$$\text{tr}(\boldsymbol{ABCD})=(\text{vec}(\boldsymbol{D}^{\text{T}}))^{\text{T}}(\boldsymbol{C}^{\text{T}}\otimes\boldsymbol{A})\text{vec}(\boldsymbol{B})=(\text{vec}(\boldsymbol{D}))^{\text{T}}(\boldsymbol{A}\otimes\boldsymbol{C}^{\text{T}})\text{vec}(\boldsymbol{B}^{\text{T}})$$

1.110 令 $\boldsymbol{A}$ 为 $m\times m$ 对称矩阵，$\boldsymbol{B}$ 为 $m\times n$ 矩阵，$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{AB}$，且 $\boldsymbol{D}=\boldsymbol{I}_m-\boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\dagger}$。证明 [4]

$$(\boldsymbol{AC})^{\dagger}=\boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{A}^{\dagger}[\boldsymbol{I}_m-(\boldsymbol{D}\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\dagger}\boldsymbol{D}\boldsymbol{A}^{\dagger}]$$

第2章　特殊矩阵

在实际应用中，经常会遇到一些元素之间存在某种关系的特殊矩阵。了解这些矩阵的内部特殊结构，有助于灵活地使用这些矩阵，简化一些问题的表示和求解。本章将重点介绍一些比较常见的特殊矩阵。为了方便读者更深入地了解和应用这些特殊矩阵，将结合一些实际问题，对其中一些特殊矩阵加以详细解说。

2.1　对称矩阵、Hermitian 矩阵与循环矩阵

虽然第 1 章已经提及过对称矩阵和 Hermitian 矩阵，但鉴于这两种矩阵的广泛存在及用途，有必要对它们专门讨论。

对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是一个其元素 a_{ij} 关于主对角线对称的实正方矩阵，即有

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A} \qquad \text{或} \qquad a_{ij}=a_{ji} \tag{2.1.1}$$

对称矩阵具有以下性质：若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都是对称矩阵，则 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$，且 $\boldsymbol{A}^{-1},\boldsymbol{A}^{m}$ (m 为正整数) 和 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}$ 仍是对称矩阵。

满足条件 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=-\boldsymbol{A}$ 的正方矩阵称为反对称矩阵。显然，为满足反对称性，主对角线上的元素必定等于零，即反对称矩阵的元素具有形式：

$$a_{ij}=\begin{cases}0, & i=j\\ -a_{ji}, & i\neq j\end{cases} \tag{2.1.2}$$

反对称矩阵具有以下性质：

(1) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 都是反对称矩阵，则 $\boldsymbol{A}^{-1},\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}$ 仍是反对称矩阵，而且 $\boldsymbol{A}^{k}$ 为对称矩阵 (k 为偶数时) 或反对称矩阵 (k 为奇数时)。

(2) 任意正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 都可以分解为一个对称矩阵 $\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$ 和一个反对称矩阵 $\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$ 之和。

零矩阵就是元素 a_{ij} 全为零的矩阵，本书中记作 $\boldsymbol{O}$。对角矩阵就是主对角线以外的元素全部为零的矩阵 (主对角线上的元素可以部分为零)，即

$$\boldsymbol{D}=\begin{bmatrix}d_1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & d_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & d_n\end{bmatrix}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n) \tag{2.1.3}$$

对角矩阵具有以下性质。

(1) 对角矩阵左乘 $\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{DA}=\begin{bmatrix}d_1 & & & 0\\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}d_1a_{11} & d_1a_{12} & \cdots & d_1a_{1n}\\ d_2a_{21} & d_2a_{22} & \cdots & d_2a_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ d_na_{n1} & d_na_{n2} & \cdots & d_na_{nn}\end{bmatrix}=[d_ia_{ij}]$$

(2) 对角矩阵右乘 $\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{AD}=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}d_1 & & & 0\\ & d_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d_n\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}d_1a_{11} & d_2a_{12} & \cdots & d_na_{1n}\\ d_1a_{21} & d_2a_{22} & \cdots & d_na_{2n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ d_1a_{n1} & d_2a_{n2} & \cdots & d_na_{nn}\end{bmatrix}=[d_ja_{ij}]$$

(3) 两个对角矩阵的和、差、积仍为对角矩阵。

中心对称矩阵 (centrosymmetric matrix) 又叫交叉对称矩阵 (cross-symmetric matrix) 或斜对称矩阵 (persymmetric matrix)，有时也简称为 c 矩阵，定义为

$$p_{ij}=p_{n-j+1,n-i+1},\qquad \forall\, i,j=1,2,\cdots,n \tag{2.1.4}$$

下面是一个 4×4 中心对称矩阵的例子：

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}p_{11} & p_{12} & p_{13} & p_{14}\\ p_{21} & p_{22} & p_{23} & p_{13}\\ p_{31} & p_{32} & p_{22} & p_{12}\\ p_{41} & p_{31} & p_{21} & p_{11}\end{bmatrix}$$

可见，$n\times n$ 中心对称矩阵是一种相对于矩阵中心点对称的矩阵，也是其元素关于交叉对角线对称的正方矩阵。换言之，中心对称矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的元素之间存在着斜对称关系。

中心对称矩阵具有以下性质。

(1) 若 $\boldsymbol{A}$ 中心对称，则 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 也中心对称。

(2) 若 $\boldsymbol{A}_i$ 中心对称，则 $\boldsymbol{A}=\sum\limits_{i=1}^{K}a_i\boldsymbol{A}_i$ 也中心对称。

(3) 若 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 和 $\boldsymbol{B}_{n\times n}$ 中心对称，则 $\boldsymbol{AB}$ 也中心对称。

(4) 中心对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 中心对称。

一个正方矩阵 $\boldsymbol{A}=[a_{ij}]\in C^{n\times n}$ 称为 Hermitian 矩阵，若 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，其中，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{A}^{*})^{T}=[a_{ji}^{*}]$。换言之，Hermitian 矩阵是一种复共轭对称矩阵。

Hermitian 矩阵又有以下几种特殊形式：

(1) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为反 Hermitian 矩阵，若 $\boldsymbol{A}=-\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$。

(2) 中央复共轭对称矩阵 $\boldsymbol{R}$ 是一个元素满足对称性 $r_{ij}=r_{n-i+1,n-j+1}^{*}$ 的 $n\times n$ 正方矩阵，也称中央 Hermitian 矩阵。

(3) 中央复共轭对称矩阵的一个特殊子类是双重对称的矩阵，它既是关于主对角线对称的 Hermitian 矩阵，又是关于交叉对角线对称的交叉对称矩阵，例如

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix} r_{11} & r_{21}^{*} & r_{31}^{*} & r_{41}^{*} \\ r_{21} & r_{22} & r_{32}^{*} & r_{31}^{*} \\ r_{31} & r_{32} & r_{22} & r_{21}^{*} \\ r_{41} & r_{31} & r_{21} & r_{11} \end{bmatrix}$$

在这种特殊情况下，$r_{ij}=r_{ji}^{*}=r_{n-j+1,n-i+1}=r_{n-i+1,n-j+1}^{*}$。

Hermitian 矩阵具有以下性质：

(1) 对所有 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$，矩阵 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 均是 Hermitian 矩阵。

(2) 若 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermitian 矩阵，则 $\boldsymbol{A}^{k}$ 对所有 $k=1,2,3,\cdots$ 都是 Hermitian 矩阵。若 $\boldsymbol{A}$ 还是非奇异的，则 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 是 Hermitian 矩阵。

(3) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是 Hermitian 矩阵，则 $a\boldsymbol{A}+b\boldsymbol{B}$ 对所有实数 α 和 β 均是 Hermitian 矩阵。

(4) 对所有 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$，$\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 为反 Hermitian 矩阵。

(5) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是反 Hermitian 矩阵，则 $\alpha\boldsymbol{A}+\beta\boldsymbol{B}$ 对所有实数 α 和 β 均是反 Hermitian 矩阵。

(6) 若 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermitian 矩阵，则 $\mathrm{j}\boldsymbol{A}$ $(\mathrm{j}=\sqrt{-1})$ 是反 Hermitian 矩阵。

(7) 若 $\boldsymbol{A}$ 是反 Hermitian 矩阵，则 $\mathrm{j}\boldsymbol{A}$ 是 Hermitian 矩阵。

循环矩阵 $\boldsymbol{C}$ 是仅由 n 个复值元素经过适当移位而组成的 $n\times n$ 正方矩阵。如果在范围 $1\leqslant i,j\leqslant n$ 内矩阵元素具有关系：

$$C_R(i,j)=\begin{cases} c_R(j-i), & j-i\geqslant 0 \\ c_R(n+j-i), & j-i<0 \end{cases} \tag{2.1.5}$$

则称这样的循环矩阵为右循环矩阵，并记作 $\boldsymbol{C}_R$。例如

$$\boldsymbol{C}_R=\begin{bmatrix} c_R(0) & c_R(1) & c_R(2) & c_R(3) \\ c_R(3) & c_R(0) & c_R(1) & c_R(2) \\ c_R(2) & c_R(3) & c_R(0) & c_R(1) \\ c_R(1) & c_R(2) & c_R(3) & c_R(0) \end{bmatrix}$$

观察知，每一行是由上一行的元素向右移一位，并把最右边的元素移到最左边构成的。

类似地，我们可以定义左循环矩阵 $\boldsymbol{C}_L$，即

$$\boldsymbol{C}_L(i,j)=\begin{cases} c_L(n+1-i-j), & j+i\leqslant n+1 \\ c_L(2n+1-i-j), & j+i>n+1 \end{cases} \tag{2.1.6}$$

下面是 4 × 4 左循环矩阵的一个例子：

$$C_L = \begin{bmatrix} c_L(3) & c_L(2) & c_L(1) & c_L(0) \\ c_L(2) & c_L(1) & c_L(0) & c_L(3) \\ c_L(1) & c_L(0) & c_L(3) & c_L(2) \\ c_L(0) & c_L(3) & c_L(2) & c_L(1) \end{bmatrix}$$

也就是说，左循环矩阵的每一行是将上一行的元素向左移一位，并将最左边的元素移到该行的最右边组成的。

2.2 基本矩阵

一个仅第 k 个元素为 1，而其他元素均为零的 $n \times 1$ 维向量称为单位向量或基本向量 (elementary vector)，记作 $\boldsymbol{e}_k$。例如 $\boldsymbol{e}_1 = [1, 0, \cdots, 0]^{\rm T}$，$\boldsymbol{e}_2 = [0, 1, 0, \cdots, 0]^{\rm T}$ 等。

引入 Kronecker δ 函数

$$\delta_{ik} = \begin{cases} 1, & i = k \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \tag{2.2.1}$$

根据定义，容易证明两个不同的基本向量的内积为 Kronecker δ 函数，即

$$\boldsymbol{e}_i^{\rm T}\boldsymbol{e}_k = \delta_{ik}$$

基本向量在矩阵分析与线性代数中起着重要的作用，因为很多特殊矩阵都可以看作是由基本向量生成的。最典型的例子是 n 阶单位矩阵 $\boldsymbol{I}_n$，由基本向量按照顺序 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_n$ 排列而成，即

$$\boldsymbol{I}_n = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 \end{bmatrix} = [\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_n]$$

用这种矩阵左乘或右乘任何矩阵 $\boldsymbol{A}$，都不改变矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的数值，即有 $\boldsymbol{IA} = \boldsymbol{AI} = \boldsymbol{A}$。

当 $n \times n$ 单位矩阵的维数已清楚或不必强调时，常省略表示单位矩阵维数的下标，将其简记作 $\boldsymbol{I}$。

特别地，对角元素均相同的对角矩阵叫做数量矩阵，记作

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} d & & & 0 \\ & d & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & d \end{bmatrix} = d\boldsymbol{I}$$

显然，$\boldsymbol{DA} = \boldsymbol{AD} = d\boldsymbol{A}$。

由基本向量生成的某些特殊矩阵常称为基本矩阵 (elementary matrix)。在文献中，共有两种不同的基本矩阵定义。

1. 基本矩阵定义 1

一个 $m\times n$ 维基本矩阵可以用 $m\times 1$ 基本向量与 $n\times 1$ 基本向量的外积定义为 [36],[60]

$$E_{ij}^{(m\times n)}=e_i^{(m)}(e_j^{(n)})^{\mathrm{T}} \tag{2.2.2}$$

式中，$e_i^{(m)}$ 表示仅第 i 个元素等于 1，其他元素全部为 0 的 $m\times 1$ 基本向量。因此，基本矩阵 $E_{ij}^{(m\times n)}$ 是一个仅 (i,j) 元素等于 1，其他元素全部为 0 的 $m\times n$ 矩阵。

在这种定义下，基本矩阵具有以下性质 [60]：

(1) $E_{ik}^{(m\times n)}E_{jl}^{(n\times r)}=\delta_{kj}E_{il}^{(m\times r)}$

(2) $A=\sum_{i=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}a_{ik}E_{ik}^{(m\times n)}$

(3) $E_{ik}^{(s\times p)}AE_{mn}^{(q\times r)}=a_{km}E_{in}^{(s\times r)}$

(4) $\left(E_{ik}^{(m\times n)}\right)^{\mathrm{T}}=E_{ki}^{(n\times m)}$

(5) $\det\left(E_{ij}^{(m\times n)}\right)=0$。

2. 基本矩阵定义 2

对 $n\times n$ 单位矩阵进行初等行 (或列) 变换得到的矩阵称为基本矩阵 [40],[236],[290],[240]。与矩阵的三种初等运算 (Ⅰ，Ⅱ，Ⅲ型初等行变换) 相对应，可以引出以下三类基本矩阵。

Ⅰ型基本矩阵 $E_{(p,q)}$：互换单位矩阵 I_n 的第 p 行和第 q 行得到的矩阵，或互换单位矩阵的第 p 列和第 q 列得到的矩阵。

Ⅱ型基本矩阵 $E_{\alpha(p)}$：用一个非零常数 α 乘以单位矩阵 I_n 的第 p 行 (或列) 得到的矩阵。

Ⅲ型基本矩阵 $E_{(p)+\alpha(q)}$：用一个非零常数 α 乘以单位矩阵 I_n 的第 q 行 (或列)，再加到 I_n 的第 p 行 (或列) 得到的矩阵。

于是，矩阵 $A_{m\times n}$ 的初等变换可以用基本矩阵表示如下。

基本矩阵左乘

(1) Ⅰ型基本矩阵左乘矩阵 A 即 $E_{(p,q)}A$ 表示互换矩阵 A 的第 p 行和第 q 行。

(2) Ⅱ型基本矩阵左乘矩阵 A 即 $E_{\alpha(p)}A$ 表示矩阵 A 的第 p 行元素乘一个非零常数 α。

(3) Ⅲ型基本矩阵左乘矩阵 A 即 $E_{(p)+\alpha(q)}A$ 表示矩阵 A 的第 q 行乘以非零常数 α 后，再与第 p 行相加。

基本矩阵右乘

(1) Ⅰ型基本矩阵右乘 A 即 $AE_{(p,q)}$ 表示互换矩阵 A 的第 p 列和第 q 列。

(2) Ⅱ型基本矩阵右乘 A 即 $AE_{\alpha(p)}$ 表示矩阵 A 的第 p 列元素乘一个非零常数 α。

(3) Ⅲ型基本矩阵右乘 A 即，$AE_{(p)+\alpha(q)}$ 表示矩阵 A 的第 q 列乘以非零常数 α 后，再与第 p 列相加。

定理 2.2.1　对应于矩阵初等变换的三种基本矩阵的行列式分别为

(1) $\det\left(\boldsymbol{E}_{(p,q)}\right) = -1$。

(2) $\det\left(\boldsymbol{E}_{\alpha(p)}\right) = \alpha$。

(3) $\det\left(\boldsymbol{E}_{(p)+\alpha(q)}\right) = 1$。

证明　(1) 不失一般性，假定 $p < q$，并令基本矩阵是互换单位矩阵 $\boldsymbol{I}_n$ 的第 p 列和第 q 列得到的矩阵，即

$$\boldsymbol{E}_{(p,q)} = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ \leftarrow \text{第 } p \text{ 行} \\ \\ \leftarrow \text{第 } q \text{ 行} \\ \\ \\ \end{matrix}$$

$$\begin{matrix} \uparrow & \quad & \uparrow \\ \text{第 } p \text{ 列} & & \text{第 } q \text{ 列} \end{matrix}$$

令 $\boldsymbol{E}_{(p,q)} = [a_{ij}]$。于是，行列式

$$\det(\boldsymbol{E}_{(p,q)}) = a_{q,p}(-1)^{q+p}\det(\boldsymbol{E}_{p,q}) = (-1)^{q+p}\det(\boldsymbol{E}_{p,q})$$

式中，$\boldsymbol{E}_{p,q}$ 是从 $\boldsymbol{E}_{(p,q)}$ 中删去第 q 行、第 p 列得到的 $(n-1)\times(n-1)$ 子矩阵。注意，在子矩阵 $\boldsymbol{E}_{p,q}$ 中，原来的第 q 列变成第 $q-1$ 列 (因为第 p 列被删去)，但原来的第 p 行仍然为第 p 行 (删去第 q 行，不影响第 p 行的位置，因为 $p < q$)。因此，有

$$\begin{aligned} \det(\boldsymbol{E}_{p,q}) &= a_{p,q}(-1)^{p+(q-1)}\det\left(\boldsymbol{E}_{(n-2)\times(n-2)}\right) \\ &= (-1)^{p+q-1}\det(\boldsymbol{I}_{n-2}) = (-1)^{p+q-1} \end{aligned}$$

式中，$\boldsymbol{E}_{(n-2)\times(n-2)}$ 是从 $(n-1)\times(n-1)$ 矩阵 $\boldsymbol{E}_{p,q}$ 中删去第 p 行、第 $q-1$ 列得到的矩阵，它恰好是一个 $(n-2)\times(n-2)$ 单位矩阵。将 $\det(\boldsymbol{E}_{p,q}) = (-1)^{p+q-1}$ 代入 $\det(\boldsymbol{E}_{(p,q)}) = (-1)^{q+p}\det(\boldsymbol{E}_{p,q})$，立即得 $\det(\boldsymbol{E}_{p,q}) = (-1)^{2p+2q-1} = -1$。

(2) 和 (3) 的证明比较简单，留给读者作练习。 ■

利用定理 2.2.1，可以得到下面的重要结果。

定理 2.2.2　$n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 互换任意两行 (或列) 得到的矩阵 $\boldsymbol{A}_{(p),(q)}$ 的行列式与原矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式存在关系式：

$$\det\left(\boldsymbol{A}_{(p),(q)}\right) = -\det(\boldsymbol{A}), \quad \forall\, p \neq q$$

证明　对于行互换矩阵 $\boldsymbol{A}_{(p),(q)} = \boldsymbol{E}_{(p),(q)}\boldsymbol{A}$，由行列式性质 $\det(\boldsymbol{AB}) = \det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{B})$ 及定理 2.2.1，立即有

$$\det\left(\boldsymbol{A}_{(p),(q)}\right) = \det\left(\boldsymbol{E}_{(p),(q)}\right)\det(\boldsymbol{A}) = -\det(\boldsymbol{A})$$

同理，对于列互换矩阵 $\boldsymbol{A}_{(p),(q)} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{E}_{(p),(q)}$，有

$$\det\left(\boldsymbol{A}_{(p),(q)}\right) = \det(\boldsymbol{A})\det\left(\boldsymbol{E}_{(p),(q)}\right) = -\det(\boldsymbol{A})$$

这就证明了本定理。 ■

推论 2.2.1

$$\det(\boldsymbol{E}_p\boldsymbol{E}_{p-1}\cdots\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{A}) = \det(\boldsymbol{E}_p)\det(\boldsymbol{E}_{p-1})\cdots\det(\boldsymbol{E}_1)\det(\boldsymbol{A})$$

$$\det(\boldsymbol{A}\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2\cdots\boldsymbol{E}_p) = \det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{E}_1)\det(\boldsymbol{E}_2)\cdots\det(\boldsymbol{E}_p)$$

有意思的是，利用基本矩阵，很容易证明一个奇异矩阵的行列式等于零。

推论 2.2.2 若 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 为奇异矩阵，则 $\det(\boldsymbol{A}) = 0$。

证明 利用初等行变换，可以将奇异矩阵 $\boldsymbol{A}$ 化成行阶梯型，并且最下面一行为零行向量。换言之，存在一系列基本矩阵 $\boldsymbol{E}_1, \boldsymbol{E}_2, \cdots, \boldsymbol{E}_p$，使得 $\boldsymbol{E}_p\boldsymbol{E}_{p-1}\cdots\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{A}$ 为一行阶梯型矩阵，其最下面一行元素全部为零。因此，行列式

$$\det(\boldsymbol{E}_p\boldsymbol{E}_{p-1}\cdots\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{A}) = 0$$

由推论 2.2.1，上式即为

$$\det(\boldsymbol{E}_p)\det(\boldsymbol{E}_{p-1})\cdots\det(\boldsymbol{E}_1)\det(\boldsymbol{A}) = 0$$

但由于基本矩阵的行列式不等于零，故上式意味着 $\det(\boldsymbol{A}) = 0$。 ■

2.3 置换矩阵、互换矩阵与选择矩阵

与单位矩阵密切相关的是置换矩阵、交换矩阵、互换矩阵和移位矩阵。这四种矩阵都只由 0 和 1 组成，并且每行和每列都只有一个非零元素 1，但非零元素 1 所处的位置不同。可以说，单位矩阵、置换矩阵、交换矩阵、互换矩阵和移位矩阵都是由基本向量的不同排列而生成的。

2.3.1 置换矩阵与互换矩阵

定义 2.3.1 一个正方矩阵称为置换矩阵 (permutation matrix)，若它的每一行和每一列有一个且仅有一个非零元素 1。

置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 有下列性质 [60]。

(1) $(\boldsymbol{P}_{m\times n})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{P}_{n\times m}$。

(2) $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$，这说明置换矩阵是正交矩阵。

(3) $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{P}^{-1}$。

(4) $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的对角线元素，但排列顺序可能不同。

例 2.3.1 给定一个 5×4 矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14}\\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24}\\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34}\\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44}\\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} \end{bmatrix}$$

若令置换矩阵

$$\boldsymbol{P}_4=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{P}_5=\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1\\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0\\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

则有

$$\boldsymbol{P}_5\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54}\\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34}\\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24}\\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44}\\ a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{A}\boldsymbol{P}_4=\begin{bmatrix} a_{14} & a_{12} & a_{11} & a_{13}\\ a_{24} & a_{22} & a_{21} & a_{23}\\ a_{34} & a_{32} & a_{31} & a_{33}\\ a_{44} & a_{42} & a_{41} & a_{43}\\ a_{54} & a_{52} & a_{51} & a_{53} \end{bmatrix}$$

就是说，用置换矩阵左乘矩阵 $\boldsymbol{A}$，相当于将 $\boldsymbol{A}$ 的行进行重新排列；而用置换矩阵右乘 $\boldsymbol{A}$，相当于对 $\boldsymbol{A}$ 的列进行重新排列。行或者列新的排列顺序由置换矩阵的结构所决定，

$p\times q$ 置换矩阵可以是 q 个 $p\times 1$ 基本向量 $\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\cdots,\boldsymbol{e}_q$ 的随意排列。如果是有规则的排列，置换矩阵便演变为几种特殊形式的置换矩阵，它们在矩阵分析与应用中经常被使用。

显然，单位矩阵就是一个特殊的置换矩阵。置换矩阵还有另外三个特殊形式：交换矩阵、互换矩阵与移位矩阵。

1. 交换矩阵

如第 1 章所述，交换矩阵 K_{mn} 定义为满足 $\boldsymbol{K}_{mn}\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_{m\times n})=\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$ 的特殊置换矩阵。这种矩阵的作用是交换 $mn\times 1$ 向量的元素位置，以便使得变换后的向量 $\boldsymbol{K}_{mn}\mathrm{vec}(\boldsymbol{A})$ 与 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$ 一致，故称交换矩阵。

2. 互换矩阵

互换矩阵 (exchange matrix) 常用符号 $\boldsymbol{J}$ 表示，定义为

$$\boldsymbol{J}=\begin{bmatrix} 0 & & & 1\\ & & 1 & \\ & \iddots & & \\ 1 & & & 0 \end{bmatrix}\tag{2.3.1}$$

它仅在交叉对角线上具有元素 1，而所有其他元素全等于零。互换矩阵又称反射矩阵 (reflection matrix) 或后向单位矩阵 (bachward identity matrix)。显然，互换矩阵可以看作是基本向量的反向排列 $[\boldsymbol{e}_n,\boldsymbol{e}_{n-1},\cdots,\boldsymbol{e}_1]$。

通过左乘和右乘，互换矩阵 $\boldsymbol{J}$ 可以将一矩阵的行或列的顺序反转 (互换)。这就是术语“互换矩阵”的涵义。具体说来，用 $m\times m$ 互换矩阵 $\boldsymbol{J}_m$ 左乘 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，将使 $\boldsymbol{A}$ 的行的顺序反转 (相对于中心水平轴互换行的位置)：

$$\boldsymbol{J}_m\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\end{bmatrix} \tag{2.3.2}$$

而用 $\boldsymbol{J}_n$ 右乘 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，则使 $\boldsymbol{A}$ 的列序反转 (相对于中心垂直轴相互交换列的位置)，即

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}_n=\begin{bmatrix} a_{1n} & \cdots & a_{12} & a_{11}\\ a_{2n} & \cdots & a_{22} & a_{21}\\ \vdots & & \vdots & \vdots\\ a_{mn} & \cdots & a_{m2} & a_{m1}\end{bmatrix} \tag{2.3.3}$$

容易验证：

$$\boldsymbol{J}^2=\boldsymbol{J}\boldsymbol{J}=\boldsymbol{I} \tag{2.3.4}$$

$$\boldsymbol{J}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{J} \tag{2.3.5}$$

前一个性质称为互换矩阵的对合性 (involuntory property)，后一个性质是互换矩阵的对称性。也就是说，互换矩阵是对合矩阵和对称矩阵。

第 1 章已介绍过，交换矩阵具有性质 $\boldsymbol{K}_{mn}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{K}_{mn}^{-1}=\boldsymbol{K}_{nm}$。显然，若 $m=n$，则有 $\boldsymbol{K}_{nn}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{K}_{nn}^{-1}=\boldsymbol{K}_{nn}$。这意味着

$$\boldsymbol{K}_{nn}^2=\boldsymbol{K}_{nn}\boldsymbol{K}_{nn}=\boldsymbol{I}_{nn} \tag{2.3.6}$$

$$\boldsymbol{K}_{nn}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{K}_{nn} \tag{2.3.7}$$

即交换矩阵和互换矩阵一样，也同时是对合矩阵和对称矩阵。

MATLAB 函数 flipud(A) 和 fliplr(A) 分别将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行和列的顺序翻转，即 $\boldsymbol{J}\boldsymbol{A}=$ flipud(A) 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}=$ fliplr(A)。

特别地，当用 $m\times m$ 互换矩阵 $\boldsymbol{J}_m$ 左乘矩阵 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，然后再用 $n\times n$ 互换矩阵 $\boldsymbol{J}_n$ 右乘 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{J}_m\boldsymbol{A}$ 时，则有

$$\boldsymbol{J}_m\boldsymbol{A}\boldsymbol{J}_n=\begin{bmatrix} a_{m,n} & a_{m,n-1} & \cdots & a_{m,1}\\ a_{m-1,n} & a_{m-1,n-1} & \cdots & a_{m-1,1}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{1,n} & a_{1,n-1} & \cdots & a_{1,1}\end{bmatrix} \tag{2.3.8}$$

在维数清楚时，将省去 $\boldsymbol{J}$ 矩阵的维数下标。与矩阵相类似，$\boldsymbol{J}\boldsymbol{c}$ 将使列向量 $\boldsymbol{c}$ 的元素顺序反转，而 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}$ 使行向量 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}$ 的顺序反转。

容易证明，若 $\boldsymbol{R}$ 是交叉对称矩阵，则 $\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{J}\boldsymbol{R}\boldsymbol{J}$ 和 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{J}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}$。

另一方面，中央对称矩阵 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{JRJ}$，而中央复共轭对称矩阵 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{JR}^*\boldsymbol{J}$。

当中央对称矩阵的维数是偶数 $(n=2r)$ 时，它可以分块为下列形式：

$$\boldsymbol{R}_{\text{even}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{JB}^*\boldsymbol{J} & \boldsymbol{JA}^*\boldsymbol{J}\end{bmatrix}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是无特殊结构的一般 $r\times r$ 矩阵。类似地，当维数是奇数 $(n=2r+1)$ 时，中央对称矩阵可以分块为

$$\boldsymbol{R}_{\text{odd}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{x} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{x}^{\text{H}} & \alpha & \boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{J}\\ \boldsymbol{JB}^*\boldsymbol{J} & \boldsymbol{Jx} & \boldsymbol{JA}^*\boldsymbol{J}\end{bmatrix}$$

式中，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是一般的 $r\times r$ 矩阵，$\boldsymbol{J}$ 是 $r\times r$ 反射矩阵，$\boldsymbol{x}$ 是 $r\times 1$ 向量，而 α 为标量。

3. 移位矩阵

$n\times n$ 移位矩阵 (shift matrix) 定义为

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}0 & 1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1\\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0\end{bmatrix}\tag{2.3.9}$$

换言之，移位矩阵的元素 $p_{i,i+1}=1\,(1\leqslant i\leqslant n-1)$，$p_{n1}=1$，其余皆为零。显然，移位矩阵可以用基本向量表示为 $\boldsymbol{P}=[\boldsymbol{e}_n,\boldsymbol{e}_1,\cdots,\boldsymbol{e}_{n-1}]$。

移位矩阵乃是因其能够使别的矩阵的首行或者最后一列移动位置而得名。例如，对一个 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，若左乘 $m\times m$ 移位矩阵 $\boldsymbol{P}_m$，则

$$\boldsymbol{P}_m\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n}\\ a_{31} & a_{32} & \cdots & a_{3n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mn}\\ a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n}\end{bmatrix}$$

相当于将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 1 行移位到第 m 行下面。类似地，若右乘 $n\times n$ 移位矩阵 $\boldsymbol{P}_n$，则

$$\boldsymbol{AP}_n=\begin{bmatrix}a_{1n} & a_{11} & \cdots & a_{1,n-1}\\ a_{2n} & a_{21} & \cdots & a_{2,n-1}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{mn} & a_{m1} & \cdots & a_{m,n-1}\end{bmatrix}$$

相当于将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 n 列移位到第 1 列前面。

容易看出，与正方的互换矩阵 $\boldsymbol{J}_n$ 和交换矩阵 $\boldsymbol{K}_{nn}$ 不同，移位矩阵既不具有对合性，也不是对称矩阵。

2.3.2 广义置换矩阵

考虑下面的观测数据模型

$$x(t) = As(t) = \sum_{i=1}^{n} a_i s_i(t) \tag{2.3.10}$$

式中，$s(t) = [s_1(t), s_2(t), \cdots, s_n(t)]^T$ 表示源信号向量；A 是一个 $m \times n$ 常系数矩阵 $(m \geqslant n)$，表示信号的混合过程，称为混合矩阵。混合矩阵是满列秩的。现在的问题是：如何仅根据 m 维观测数据向量 $x(t)$ 恢复 n 维源信号向量 $s(t)$。这个问题称为盲信号分离或者数据压缩 (m 比 n 明显大时)。这里，术语“盲”具有两层涵义：源信号 $s_1(t), s_2(t), \cdots, s_n(t)$ 不可观测，信号如何混合未知 (即混合矩阵 A 未知)。

盲信号分离问题的核心是混合矩阵 A 的广义逆矩阵 $A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$ 的辨识，因为源信号向量很容易利用 $s(t) = A^\dagger x(t)$ 恢复。然而，混合矩阵的辨识存在两种模糊性。

(1) 观察知，若源信号向量中第 i 个和第 j 个信号交换顺序，并且混合矩阵 A 的第 i 列和第 j 列也交换位置的话，则观测数据向量不变。这说明，仅根据观测数据向量，是不可能辨识源信号的排列顺序的。这种模糊性称为分离信号的排序不确定性。

(2) 由观测数据模型易知

$$x(t) = \sum_{i=1}^{n} \frac{a_i}{\alpha_i} \alpha_i s_i(t)$$

这表明，仅根据观测数据向量，也不可能辨识源信号 $s_i(t)$ 的精确幅值。这种模糊性称为分离信号的幅值不确定性。

虽然存在分离信号的排序不确定性和幅值不确定性，但是从信号分离的角度看问题，这两种不确定性是允许的，因为原来混合的信号已被分离开，而且一个固定的尺度因子的误差最多只影响信号的初始相位，并不影响信号的波形。信号的波形通常保留了信号的有用信息。

由于盲信号分离存在分离信号的排序不确定性和幅值不确定性，所以辨识出来的混合矩阵会相应存在两种不确定性：各列排序的不确定性和每列元素可能相差一个固定的常数倍。矩阵列排序的不确定性很容易利用置换矩阵刻画，而矩阵列排序的不确定性和每列元素的倍数误差这两种不确定性则可以通过广义置换矩阵一并描述。

定义 2.3.2 一个正方矩阵称为广义置换矩阵 (generalized permutation matrix)，简称 g 矩阵，若其每行和每列有一个并且仅有一个非零元素。

根据定义知，如果用广义置换矩阵左乘 (或右乘)，则不仅使矩阵 A 的行 (或列) 进行重新排列，而且每行 (或列) 的元素还同乘一个比例因子。例如

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 \\ \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & a_{34} \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & a_{44} \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & a_{54} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha a_{51} & \alpha a_{52} & \alpha a_{53} & \alpha a_{54} \\ \beta a_{31} & \beta a_{32} & \beta a_{33} & \beta a_{34} \\ \gamma a_{21} & \gamma a_{22} & \gamma a_{23} & \gamma a_{24} \\ \lambda a_{41} & \lambda a_{42} & \lambda a_{43} & \lambda a_{44} \\ \rho a_{11} & \rho a_{12} & \rho a_{13} & \rho a_{14} \end{bmatrix}$$

容易证明，一个正方矩阵是 g 矩阵，当且仅当它可以分解为一个置换矩阵和一个非奇异的对角矩阵之积，即有

$$G = PD \tag{2.3.11}$$

式中，$\boldsymbol{D}$ 为非奇异的对角矩阵。例如

$$G = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & \alpha \\ 0 & 0 & \beta & 0 & 0 \\ 0 & \gamma & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda & 0 \\ \rho & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \rho & & & & 0 \\ & \gamma & & & \\ & & \beta & & \\ & & & \lambda & \\ 0 & & & & \alpha \end{bmatrix}$$

回到刚才的盲信号分离问题，易知其核心问题即是辨识 $\boldsymbol{PDA}^\dagger$，然后利用 $\boldsymbol{s}(t) = \boldsymbol{PDA}^\dagger \boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{GA}^\dagger \boldsymbol{x}(t)$ 得到分离的信号，其中，$\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 分别是置换矩阵和对角矩阵，而 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{PD}$ 为广义置换矩阵。

2.3.3 选择矩阵

顾名思义，选择矩阵 (selective matrix) 是一种可以对某个给定矩阵的某些行或者某些列进行选择的矩阵。以 $m \times N$ 矩阵

$$X = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1(1) & \boldsymbol{x}_1(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_1(N) \\ \boldsymbol{x}_2(1) & \boldsymbol{x}_2(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_2(N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \boldsymbol{x}_m(1) & \boldsymbol{x}_m(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_m(N) \end{bmatrix}$$

为例。令

$$\boldsymbol{J}_1 = [\boldsymbol{I}_{m-1}, \boldsymbol{0}_{m-1}], \qquad \boldsymbol{J}_2 = [\boldsymbol{0}_{m-1}, \boldsymbol{I}_{m-1}]$$

是两个 $(m-1) \times m$ 矩阵，式中，$\boldsymbol{I}_{m-1}$ 和 $\boldsymbol{0}_{m-1}$ 分别是 $(m-1) \times (m-1)$ 单位矩阵和 $(m-1) \times 1$ 零向量。

直接计算，得

$$\boldsymbol{J}_1\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1(1) & \boldsymbol{x}_1(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_1(N) \\ \boldsymbol{x}_2(1) & \boldsymbol{x}_2(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_2(N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \boldsymbol{x}_{m-1}(1) & \boldsymbol{x}_{m-1}(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_{m-1}(N) \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{J}_2\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_2(1) & \boldsymbol{x}_2(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_2(N) \\ \boldsymbol{x}_3(1) & \boldsymbol{x}_3(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_3(N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \boldsymbol{x}_m(1) & \boldsymbol{x}_m(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_m(N) \end{bmatrix}$$

即是说，矩阵 $\boldsymbol{J}_1\boldsymbol{X}$ 选择的是原矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的前 $m-1$ 行，而矩阵 $\boldsymbol{J}_2\boldsymbol{X}$ 选择出原矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的后 $m-1$ 行。

类似地，若令

$$\boldsymbol{J}_1 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_{N-1} \\ \boldsymbol{0}_{N-1} \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{J}_2 = \begin{bmatrix} \boldsymbol{0}_{N-1} \\ \boldsymbol{I}_{N-1} \end{bmatrix}$$

是两个 $N\times(N-1)$ 矩阵，则

$$
\boldsymbol{XJ}_1=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1(1) & \boldsymbol{x}_1(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_1(N-1)\\ \boldsymbol{x}_2(1) & \boldsymbol{x}_2(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_2(N-1)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \boldsymbol{x}_m(1) & \boldsymbol{x}_m(2) & \cdots & \boldsymbol{x}_m(N-1)\end{bmatrix}
$$

$$
\boldsymbol{XJ}_2=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1(2) & \boldsymbol{x}_1(3) & \cdots & \boldsymbol{x}_1(N)\\ \boldsymbol{x}_2(2) & \boldsymbol{x}_2(3) & \cdots & \boldsymbol{x}_2(N)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \boldsymbol{x}_m(2) & \boldsymbol{x}_m(3) & \cdots & \boldsymbol{x}_m(N)\end{bmatrix}
$$

换言之，矩阵 $\boldsymbol{XJ}_1$ 选择的是原矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的前 $N-1$ 列，而矩阵 $\boldsymbol{XJ}_2$ 选择出原矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的后 $N-1$ 列。

2.4 正交矩阵与酉矩阵

向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_k\in C^n$ 组成一正交组，若 $\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_j=0,\ 1\leqslant i<j\leqslant k$。此外，若向量还是归一化的，即 $\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_i=1,\ i=1,2,\cdots,k$，则该正交组称为标准正交组。

定理 2.4.1 一组正交的非零向量是线性无关的。

证明 假设 $\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_k\}$ 是一正交组，并假定 $0=\alpha_1\boldsymbol{x}_1+\alpha_2\boldsymbol{x}_2+\cdots+\alpha_k\boldsymbol{x}_k$。于是有

$$
0=\boldsymbol{0}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{0}=\sum_{i=1}^{k}\sum_{j=1}^{k}\alpha_i^*\alpha_j\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_j=\sum_{i=1}^{k}|\alpha_i|^2\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_i
$$

因为向量是正交的，又因 $\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_i>0$，故 $\sum\limits_{i=1}^{k}|\alpha_i|^2\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_i=0$ 的条件是所有 $|\alpha_i|^2=0$ 即所有 $\alpha_i=0$，从而 $\{\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_k\}$ 是线性无关的。 ■

定义 2.4.1 一实的正方矩阵 $\boldsymbol{Q}\in R^{n\times n}$ 称为正交矩阵，若

$$
\boldsymbol{QQ}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I} \tag{2.4.1}
$$

一复值正方矩阵 $\boldsymbol{U}\in C^{n\times n}$ 称为酉矩阵，若

$$
\boldsymbol{UU}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I} \tag{2.4.2}
$$

实矩阵 $\boldsymbol{Q}_{m\times n}$ 称为半正交矩阵 (semi-orthogonal matrix)，若它只满足 $\boldsymbol{QQ}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}_m$ 或者 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}_n$。类似地，复矩阵 $\boldsymbol{U}_{m\times n}$ 称为仿酉矩阵 (para-unitary matrix)，若它只满足 $\boldsymbol{UU}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{I}_m$ 或者 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{I}_n$。

在有些文献 (例如文献 [142] 等) 中，半正交矩阵被称为标准正交矩阵 (orthonormal matrix)。

由于正交矩阵事实上就是实的酉矩阵，所以下面只讨论酉矩阵。

定理 2.4.2 (酉矩阵的性质) 若 $U \in C^{n\times n}$，则下列叙述等价：

(1) $\boldsymbol{U}$ 是酉矩阵；

(2) $\boldsymbol{U}$ 是非奇异的，并且 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}^{-1}$；

(3) $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$；

(4) $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 是酉矩阵；

(5) $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1、\boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n]$ 的列组成标准正交组，即

$$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_j = \delta(i-j) = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i\neq j \end{cases}$$

(6) $\boldsymbol{U}$ 的行组成标准正交组；

(7) 对所有 $\boldsymbol{x} \in C^n$ 而言，$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{x}$ 的 Euclidean 长度与 $\boldsymbol{x}$ 的 Euclidean 长度相同，即 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$。

证明 叙述 (1) 意味着叙述 (2)，因为 $\boldsymbol{U}^{-1}$ 是用它左乘 $\boldsymbol{U}$ 产生单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 的唯一矩阵，酉矩阵的定义保证了 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 是这样的矩阵。在 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}^{-1}$ 两边分别左乘和右乘 $\boldsymbol{U}$，即得 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$，所以叙述 (2) 意味着叙述 (3)。因为 $(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}$，故叙述 (3) 意味着 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 满足是酉矩阵的必要条件，即叙述 (3) 意味着叙述 (4)。由于以上每个推理都可以反推回去，所以叙述 (1)~ 叙述 (4) 等价。根据矩阵乘法的技巧，若设 $\boldsymbol{u}_i$ 表示 $\boldsymbol{U}$ 的第 i 列，那么 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$ 就意味着

$$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_j = \begin{cases} 0, & j\neq i \\ 1, & j=i \end{cases}$$

因此，$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{I}$ 的另外一种解释是，$\boldsymbol{U}$ 的各列是标准正交组。这就证明了叙述 (1) 与叙述 (5) 等价。同理可证叙述 (1) 与叙述 (6) 等价。叙述 (1) 与叙述 (7) 的等价关系的证明比较复杂，感兴趣的读者可参考文献 [224]。 ■

若线性变换矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为酉矩阵，则线性变换 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 称为酉变换。酉变换具有以下性质。

(1) 向量内积在酉变换下是不变的，即

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle = \langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}\rangle \tag{2.4.3}$$

这是因为 $\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}\rangle = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y} = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle$。

(2) 向量范数在酉变换下是不变的，即

$$\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|^2 = \|\boldsymbol{x}\|^2 \tag{2.4.4}$$

因为 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|^2 = \langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\rangle = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}\rangle = \|\boldsymbol{x}\|^2$。

(3) 两个向量的夹角在酉变换下也是不变的，即

$$\cos\theta = \frac{\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}\rangle}{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}\|} = \frac{\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}\rangle}{\|\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{y}\|} \tag{2.4.5}$$

这是酉变换前两个性质的综合应用结果。

m 维向量空间到 m 维向量空间的线性变换的概念可以推广为 m 维向量空间到 n 维向量空间的线性变换。作为酉变换的一个推广，即可得到子酉变换 (subunitary trnsformation)。使用符号 $\langle\cdot,\cdot\rangle_m$ 和 $\langle\cdot,\cdot\rangle_n$ 分别表示 m 维和 n 维向量空间的内积。与之对应的向量范数分别用 $\|\cdot\|_m$ 和 $\|\cdot\|_n$ 表示。

定义 2.4.2[383] $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为部分等距变换 (partial isometry transformation) 或子酉变换，若

$$\|\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{x}_2\|_n=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_2\|_m,\quad \forall \boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\in \mathcal{C}(\boldsymbol{A}^{\#}) \tag{2.4.6}$$

或等价为

$$\langle\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\rangle_n=\langle\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_2\rangle_m,\quad \forall \boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2\in \mathcal{C}(\boldsymbol{A}^{\#}) \tag{2.4.7}$$

式中，$\mathcal{C}(\boldsymbol{A}^{\#})$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}^{\#}$ 的列空间，而 $\boldsymbol{A}^{\#}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的伴随矩阵，满足

$$\langle\boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle_m=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{A}^{\#}\boldsymbol{y}\rangle_n \tag{2.4.8}$$

酉矩阵的行列式的值等于 1 或 -1，或者绝对值等于 1，即

$$|\det(\boldsymbol{A})|=1,\quad \boldsymbol{A}\ \text{为酉矩阵} \tag{2.4.9}$$

证明如下：根据行列式性质知，对于任何复矩阵，有

$$\det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})=\det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})\det(\boldsymbol{A})=\det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{A})=[\det(\boldsymbol{A})]^2$$

当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为酉矩阵时，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$，而单位矩阵的行列式等于 1。因此，上式变成 $[\det(\boldsymbol{A})]^2=\det(\boldsymbol{I})=1$，即得 $|\det(\boldsymbol{A})|=1$。

总结前面几节的讨论，表 2.4.1 归纳出了实向量、实矩阵与复向量、复矩阵之间的性质比较。

表 2.4.1 实向量、实矩阵与复向量、复矩阵的性质比较

实向量、实矩阵	复向量、复矩阵
范数：$\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_n^2}$	范数：$\|\boldsymbol{x}\|=\sqrt{\|x_1\|^2+\|x_2\|^2+\cdots+\|x_n\|^2}$
转置：$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=[a_{ji}]$，$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$	共轭转置：$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=[a_{ji}^*]$，$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$
内积：$\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$	内积：$\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}$
正交性：$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=0$	正交性：$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=0$
对称矩阵：$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}$	Hermitian 矩阵：$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$
正交矩阵：$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{Q}^{-1}$	酉矩阵：$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}^{-1}$
特征值分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{Q}^{-1}$	特征值分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{-1}$
范数的正交不变性：$\|\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x}\|=\|\boldsymbol{x}\|$	范数的酉不变性：$\|\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}\|=\|\boldsymbol{x}\|$
内积的正交不变性：$\langle\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x},\boldsymbol{Q}\boldsymbol{y}\rangle=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$	内积的酉不变性：$\langle\boldsymbol{U}\boldsymbol{x},\boldsymbol{U}\boldsymbol{y}\rangle=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$

定义 2.4.3 一个满足 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}$ 的矩阵 $\boldsymbol{B}\in C^{n\times n}$ 被称为是与 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 酉等价的。如果 $\boldsymbol{U}$ 取实数 (因而是实正交的)，则称 $\boldsymbol{B}$ 是与 $\boldsymbol{A}$ 正交等价的。

定理 2.4.3 若 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}=[a_{ij}]$ 和 $\boldsymbol{B}=[b_{ij}]$ 是酉等价的，则

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|b_{ij}|^2=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2$$

证明 利用矩阵乘法知 $\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})$。因此，只要证明 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})$ 即可。由于矩阵的迹是相似不变量，所以若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是酉等价的，即 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}$，则有 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})$，从而定理得证。 ■

定理 2.4.3 说明 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})$ 是酉相似不变量，即 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})$，若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 酉等价。

定义 2.4.4 矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 称为正规矩阵 (normal matrix)，若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$。

定理 2.4.4 矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 是正规矩阵，当且仅当存在 $n\times n$ 酉矩阵 $\boldsymbol{U}$，使得

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n) \tag{2.4.10}$$

证明 首先对任何矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 和任意酉矩阵 $\boldsymbol{V}\in C^{n\times n}$，若 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}$，则容易验证 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$，即 $\boldsymbol{B}$ 是正规矩阵。现令 $\boldsymbol{U}$ 是一个酉矩阵，使得 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{T}$ 为上三角矩阵。于是，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 成立，当且仅当 $\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{T}$。令上三角矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的元素为 t_{ij}，则有 $t_{ij}=0,\forall i>j$，即

$$t_{12}=t_{13}=\cdots=t_{1n}=0,\quad t_{23}=t_{24}=\cdots=t_{2n}=0,\cdots,t_{n-1,n}=0$$

由此知矩阵 $\boldsymbol{T}$ 为对角矩阵。反之，若 $\boldsymbol{T}$ 为对角矩阵，则 $\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{T}$ 成立，从而矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵。 ■

容易证明，Hermitian 矩阵、斜 Hermitian 矩阵和酉矩阵都属于正规矩阵。

下面汇总了酉矩阵的有用性质 [290]。

(1) $\boldsymbol{A}_{m\times m}$ 为酉矩阵 $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{A}$ 的列是标准正交的向量。

(2) $\boldsymbol{A}_{m\times m}$ 为酉矩阵 $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{A}$ 的行是标准正交的向量。

(3) $\boldsymbol{A}_{m\times m}$ 为酉矩阵 $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}_m$

$\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 为酉矩阵

$\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 为酉矩阵

$\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{A}^{*}$ 为酉矩阵

$\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{A}^{-1}$ 为酉矩阵

$\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{A}^{i}$ 为酉矩阵，$i=1,2,\cdots$

(4) $\boldsymbol{A}_{m\times m}$ 为实矩阵：$\boldsymbol{A}$ 为酉矩阵 $\Leftrightarrow$ $\boldsymbol{A}$ 为正交矩阵。

(5) $\boldsymbol{A}_{m\times m}, \boldsymbol{B}_{m\times m}$ 为酉矩阵 $\Rightarrow$ $\boldsymbol{AB}$ 为酉矩阵。

(6) 若 $\boldsymbol{A}_{m\times m}$ 为酉矩阵，则

① $\det(\boldsymbol{A})$ 的绝对值等于 1。

② $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = m$。

③ $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵，即 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\text{H}} = \boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A}$。

④ λ 为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\Rightarrow$ $|\lambda| = 1$。

⑤ $\boldsymbol{B}_{m\times n}$ $\Rightarrow$ $\|\boldsymbol{AB}\|_{\text{F}} = \|\boldsymbol{B}\|_{\text{F}}$。

⑥ $\boldsymbol{B}_{n\times m}$ $\Rightarrow$ $\|\boldsymbol{BA}\|_{\text{F}} = \|\boldsymbol{B}\|_{\text{F}}$。

⑦ $\boldsymbol{x}_{m\times 1}$ $\Rightarrow$ $\|\boldsymbol{Ax}\|_2 = \|\boldsymbol{x}\|_2$。

(7) 若 $\boldsymbol{A}_{m\times m}, \boldsymbol{B}_{n\times n}$ 为酉矩阵，则

① $\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B}$ 为酉矩阵。

② $\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B}$ 为酉矩阵。

一个对角元素只取 $+1$ 和 -1 两种值的 $N \times N$ 对角矩阵称为符号矩阵 (signature matrix)。利用符号矩阵，可以引出与正交矩阵相仿的 J 正交矩阵的定义。

定义 2.4.5 令 $\boldsymbol{J}$ 为 $N \times N$ 符号矩阵，满足

$$\boldsymbol{QJQ}^{\text{T}} = \boldsymbol{J} \tag{2.4.11}$$

的 $N \times N$ 矩阵称为 J 正交矩阵 (J-orthogonal matrix)，或称超正规矩阵 (hypernormal matrix)。

由符号矩阵的结构特点知，满足

$$\boldsymbol{Q}\begin{bmatrix} \boldsymbol{J}_m & \boldsymbol{O}_{m\times(N-m)} \\ \boldsymbol{O}_{(N-m)\times m} & \boldsymbol{I}_{N-m} \end{bmatrix}\boldsymbol{Q}^{\text{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{J}_m & \boldsymbol{O}_{m\times(N-m)} \\ \boldsymbol{O}_{(N-m)\times m} & \boldsymbol{I}_{N-m} \end{bmatrix} \tag{2.4.12}$$

的 $N \times N$ 矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 也符合 $\boldsymbol{J}$ 正交矩阵的定义。

由定义易知，当符号矩阵取单位矩阵，即 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{I}$ 时，J 正交矩阵退化为正交矩阵。因此，更确切地说，正交矩阵实质上是单位正交矩阵。

J 正交矩阵具有以下性质。

(1) J 正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 非奇异，其行列式的绝对值等于 1。

证明如下：取式 (2.4.11) 两边的行列式，有

$$\det(\boldsymbol{Q})\det(\boldsymbol{J})\det(\boldsymbol{Q}^{\text{T}}) = \det(\boldsymbol{J})$$

即有 $\det(\boldsymbol{Q})\det(\boldsymbol{Q}^{\text{T}}) = 1$，因为 $\det(\boldsymbol{J})$ 等于 $+1$ 或者 -1 (取决于对角元素取 -1 的个数)。但是，由于 $\det(\boldsymbol{Q}^{\text{T}}) = \det(\boldsymbol{Q})$，故 $|\det(\boldsymbol{Q})| = 1$，即 J 正交矩阵非奇异。

(2) 任何一个 $N \times N$ 维 J 正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 也可以等价定义为

$$\boldsymbol{Q}^{\text{T}}\boldsymbol{JQ} = \boldsymbol{J} \tag{2.4.13}$$

证明如下：容易验证 $J^2 = I_N$。用 QJ 左乘定义式 $QJQ^{\mathrm{T}} = J$，直接得

$$QJ(QJQ^{\mathrm{T}}) = QJJ = Q$$

由于 J 正交矩阵非奇异，故上式两边可以同时左乘 JQ^{-1}，从而有 $J^2(QJQ^{\mathrm{T}}) = J$。注意到 $J^2 = I$，故上式直接给出式 (2.4.13)。

综合式 (2.4.11) 和式 (2.4.13)，立即得

$$Q^{\mathrm{T}}JQ = QJQ^{\mathrm{T}} \tag{2.4.14}$$

这一对称性称为“双曲对称性”(hyperbolic symmetry)。

矩阵

$$Q = J - 2\frac{vv^{\mathrm{T}}}{v^{\mathrm{T}}Jv} \tag{2.4.15}$$

称为双曲 Householder 矩阵。这种矩阵是 Bunse-Gerstner [68] 在研究特征值计算时定义的。显然，若 $J = I$，则双曲 Householder 矩阵退化为 Householder 矩阵。

2.5 带型矩阵与三角矩阵

三角矩阵是矩阵的分解与变换的标准形式之一，它又是带型矩阵的一个特例。

2.5.1 带型矩阵

满足条件 $a_{ij} = 0, |i-j| > k$ 的矩阵 $A \in C^{m\times n}$ 称为带型矩阵 (banded matrix)。特别地，若 $a_{ij} = 0, \forall\, i > j + p$，就称 A 具有下带宽 p；若 $a_{ij} = 0, \forall\, j > i + q$，则称矩阵 A 具有上带宽 q。下面是一个 7×5 带型矩阵的例子，它具有下带宽 1 和上带宽 2：

$$\begin{bmatrix} \times & \times & \times & 0 & 0 \\ \times & \times & \times & \times & 0 \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

其中，$\times$ 表示任意非零元素。

带型矩阵的一种特殊形式是特别令人感兴趣的，这就是三对角矩阵。矩阵 $A \in C^{n\times n}$ 是三对角矩阵，若每当 $|i-j| > 1$ 时 $a_{ij} = 0$。显然，三对角矩阵是上、下带宽各为 1 的带型正方矩阵。另外一方面，三对角矩阵也是下述 Hessenberg 矩阵的一个特例。

$n \times n$ 正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为上 Hessenberg 矩阵，若它具有形式

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ 0 & a_{32} & a_{33} & \cdots & a_{3n} \\ 0 & 0 & a_{43} & \cdots & a_{4n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & a_{nn} \end{bmatrix}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称作下 Hessenberg 矩阵，若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 是上 Hessenberg 矩阵。

事实上，三对角矩阵就是一个既是上 Hessenberg，又是下 Hessenberg 的正方矩阵。

给定一个上 Hessenberg 矩阵，可以很容易地对它进行 QR 分解，这就是所谓的 Hessenberg QR 分解。另外，给定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，我们需要将 $\boldsymbol{A}$ 变换成上 Hessenberg 矩阵，$\boldsymbol{B}$ 变换为上三角矩阵，这就是 Hessenberg 三角化简即 QZ 分解，将在下一章讨论。

2.5.2 三角矩阵

两种特殊的常用带型矩阵为上三角矩阵和下三角矩阵。三角矩阵是矩阵分解中的典范形式之一。

满足条件 $a_{ij} = 0, i > j$ 的正方矩阵 $\boldsymbol{U} = [u_{ij}]$ 称为上三角矩阵 (upper triangular matrix)，其一般形式为

$$\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & \cdots & u_{1n} \\ 0 & u_{22} & \cdots & u_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & u_{nn} \end{bmatrix}$$

满足条件 $l_{ij} = 0, i < j$ 的正方矩阵 $\boldsymbol{L} = [l_{ij}]$ 称为下三角矩阵 (lower triangular matrix)，其一般形式为

$$\boldsymbol{L} = \begin{bmatrix} l_{11} & & & 0 \\ l_{12} & l_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \cdots & l_{nn} \end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad |\boldsymbol{L}| = l_{11} l_{22} \cdots l_{nn}$$

将有关三角矩阵的定义加以归纳，一个正方矩阵 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 称为

下三角矩阵，若　$a_{ij} = 0\,(i < j)$;
严格下三角矩阵，若　$a_{ij} = 0\ (i \leqslant j)$;
单位下三角矩阵，若　$a_{ij} = 0\ (i < j),\ a_{ii} = 1\ (\forall\, i)$;
上三角矩阵，若　$a_{ij} = 0\ (i > j)$;
严格上三角矩阵，若　$a_{ij} = 0\ (i \geqslant j)$;
单位上三角矩阵，若　$a_{ij} = 0\ (i > j),\ a_{ii} = 1\ (\forall\, i)$。

下面列举上三角矩阵的性质。

(1) 上三角矩阵之积为上三角矩阵，即若 $\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2,\cdots,\boldsymbol{U}_k$ 各为上三角矩阵，则 $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_2\cdots\boldsymbol{U}_k$ 为上三角矩阵。

(2) 上三角矩阵 $\boldsymbol{U}=[u_{ij}]$ 的行列式等于对角线元素之积，即

$$\det(\boldsymbol{U})=u_{11}u_{22}\cdots u_{nn}=\prod_{i=1}^{n}u_{ii}$$

(3) 上三角矩阵的逆矩阵为下三角矩阵。

(4) 上三角矩阵 $\boldsymbol{U}_{n\times n}$ 的 k 次幂 $\boldsymbol{U}^k$ 仍为上三角矩阵，并且其第 i 个对角线元素等于 u_{ii}^k。

(5) 上三角矩阵 $\boldsymbol{U}_{n\times n}=\boldsymbol{U}=[u_{ij}]$ 的特征值为 $u_{11},u_{22},\cdots,u_{nn}$。

(6) 正定 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以分解为 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{D}\boldsymbol{T}$，其中，$\boldsymbol{T}$ 为单位上三角复矩阵，$\boldsymbol{D}$ 为实对角矩阵。

下三角矩阵的性质如下。

(1) 下三角矩阵之积为下三角矩阵，即若 $\boldsymbol{L}_1,\boldsymbol{L}_2,\cdots,\boldsymbol{L}_k$ 各为下三角矩阵，则 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{L}_1\boldsymbol{L}_2\cdots\boldsymbol{L}_k$ 为下三角矩阵。

(2) 下三角矩阵的行列式等于对角线元素之积，即

$$\det(\boldsymbol{L})=l_{11}l_{22}\cdots l_{nn}=\prod_{i=1}^{n}l_{ii}$$

(3) 下三角矩阵的逆矩阵为上三角矩阵。

(4) 下三角矩阵 $\boldsymbol{L}_{n\times n}$ 的 k 次幂 $\boldsymbol{L}^k$ 仍为下三角矩阵，且第 i 个对角线元素等于 l_{ii}^k。

(5) 下三角矩阵 $\boldsymbol{L}_{n\times n}$ 的特征值为 $l_{11},l_{22},\cdots,l_{nn}$。

(6) 一个正定矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 能够分解为下三角矩阵 $\boldsymbol{L}_{n\times n}$ 与其转置之积，即

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\quad(\boldsymbol{A}\text{ 正定，且 }\boldsymbol{L}\text{ 下三角})$$

这一分解称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Cholesky 分解。

有时称满足 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$ 的下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的平方根。更一般地，满足

$$\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{A} \tag{2.5.1}$$

的任何矩阵 $\boldsymbol{B}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的平方根，记作 $\boldsymbol{A}^{1/2}$。需要注意的是，一个正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的平方根不一定是唯一的。

特别地，若

$$\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}a_1b_1 & 0 & \cdots & 0\\ a_2b_1 & a_2b_2 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_nb_1 & a_nb_2 & \cdots & a_nb_n\end{bmatrix} \tag{2.5.2}$$

则其行列式 $|C| = (a_1a_2\cdots a_n)(b_1b_2\cdots,b_n)$，逆矩阵为 [369, pp.23~27]

$$C^{-1} = \begin{bmatrix} (a_1b_1)^{-1} & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -(a_1b_2)^{-1} & (a_2b_2)^{-1} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & (a_{n-1}b_{n-1})^{-1} & 0 \\ 0 & 0 & \cdots & -(a_{n-1}b_n)^{-1} & (a_nb_n)^{-1} \end{bmatrix} \tag{2.5.3}$$

即逆矩阵除第 1 行外，每行只有 2 个非零元素。如第 k 行的第 $k-1$ 个元素为 $-(a_{k-1}b_k)^{-1}$，第 k 个元素为 $(a_kb_k)^{-1}$，其中，$k=2,3,\cdots,n$。

容易求出分块三角矩阵的求逆公式为

$$\begin{bmatrix} A & O \\ B & C \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A^{-1} & O \\ -C^{-1}BA^{-1} & C^{-1} \end{bmatrix} \tag{2.5.4}$$

$$\begin{bmatrix} A & B \\ C & O \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} O & C^{-1} \\ B^{-1} & -B^{-1}AC^{-1} \end{bmatrix} \tag{2.5.5}$$

$$\begin{bmatrix} A & B \\ O & C \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} A^{-1} & -A^{-1}BC^{-1} \\ O & C^{-1} \end{bmatrix} \tag{2.5.6}$$

假定对角线或者交叉对角线上的矩阵是可逆的。

2.6 中心化矩阵与对角加矩阵

一个 $m\times n$ 矩阵称为等元素矩阵，若其所有元素取相同数值。作为等元素矩阵的特例，先考虑所有元素皆为 1 的 $n\times 1$ 特殊矩阵。

2.6.1 求和向量与中心化矩阵

所有元素为 1 的向量称为求和向量 (summuing vector)，记为 $\mathbf{1}=[1,1,\cdots,1]^{\mathrm{T}}$。以 $n=4$ 为例，求和向量 $\mathbf{1}=[1,1,1,1]^{\mathrm{T}}$。之所以称为求和向量，乃是因为 n 个标量的求和都可以表示为求和向量与另外一个向量之间的内积。

例 2.6.1 若令 $x=[a,b,-c,d]^{\mathrm{T}}$，则求和 $a+b-c+d$ 可以表示为

$$a+b-c+d = [1,1,1,1]\begin{bmatrix} a \\ b \\ -c \\ d \end{bmatrix} = \mathbf{1}^{\mathrm{T}}x$$

或

$$a+b-c+d = [a,b,-c,d]\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = x^{\mathrm{T}}\mathbf{1}$$

在某些运算中，可能遇到不同维数的求和向量。此时，为了避免混淆，常写出求和向量的维数，如 $\mathbf{1}_3 = [1,1,1]^{\mathrm{T}}$。考虑求和向量与矩阵的乘积

$$\mathbf{1}_3^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}_{3\times 2} = [1,1,1] \begin{bmatrix} 4 & -1 \\ -4 & 3 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} = [1,1] = \mathbf{1}_2^{\mathrm{T}}$$

求和向量与自己的内积是一个等于该向量维数的标量，即有

$$\mathbf{1}_n^{\mathrm{T}} \mathbf{1}_n = n \tag{2.6.1}$$

求和向量之间的外积是一个所有元素为 1 的矩阵，例如

$$\mathbf{1}_2 \mathbf{1}_3^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \end{bmatrix} [1,1,1] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{J}_{2\times 3}$$

更一般地，有

$$\mathbf{1}_p \mathbf{1}_q^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{J}_{p\times q} \quad (\text{所有元素为 1 的矩阵}) \tag{2.6.2}$$

于是，一个所有元素为 α 的 $p \times q$ 矩阵可以表示为 $\alpha \boldsymbol{J}_{p\times q}$。

容易验证

$$\boldsymbol{J}_{m\times p} \boldsymbol{J}_{p\times n} = p \boldsymbol{J}_{m\times n} \tag{2.6.3}$$

$$\boldsymbol{J}_{p\times q} \mathbf{1}_q = q \mathbf{1}_p \quad \text{和} \quad \mathbf{1}_p^{\mathrm{T}} \boldsymbol{J}_{p\times q} = p \mathbf{1}_q^{\mathrm{T}} \tag{2.6.4}$$

特别地，对于 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{J}_n$，有

$$\boldsymbol{J}_n = \mathbf{1}_n \mathbf{1}_n^{\mathrm{T}} \tag{2.6.5}$$

$$\boldsymbol{J}_n^2 = n \boldsymbol{J}_n \tag{2.6.6}$$

于是，若令

$$\bar{\boldsymbol{J}}_n = \frac{1}{n} \boldsymbol{J}_n \tag{2.6.7}$$

则有

$$\bar{\boldsymbol{J}}_n^2 = \bar{\boldsymbol{J}}_n \tag{2.6.8}$$

即 $\bar{\boldsymbol{J}}_n$ 是一个幂等矩阵。

定义矩阵

$$\boldsymbol{C}_n = \boldsymbol{I}_n - \bar{\boldsymbol{J}}_n = \boldsymbol{I}_n - \frac{1}{n} \boldsymbol{J}_n \tag{2.6.9}$$

这一矩阵在数理统计中称为中心化矩阵 (centering matrix)。易知，中心化矩阵具有以下特性：

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{C}_n = \boldsymbol{C}_n^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{C}_n^2 \\ \boldsymbol{C}_n \mathbf{1} = \mathbf{0} \\ \boldsymbol{C}_n \boldsymbol{J}_n = \boldsymbol{J}_n \boldsymbol{C}_n = \mathbf{0} \end{aligned}\right\} \tag{2.6.10}$$

求和向量 $\mathbf{1}$ 与中心化矩阵 $\boldsymbol{J}$ 在数理统计中非常有用 [411, p.67]。

首先，一组数据 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的均值可以用求和向量表示，即有

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i = \frac{1}{n}(x_1 + x_2 + \cdots + x_n) = \frac{1}{n}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\mathbf{1} = \frac{1}{n}\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \tag{2.6.11}$$

式中，$\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^{\mathrm{T}}$ 为数据向量。

其次，利用中心化矩阵的定义式 (2.6.9) 及其性质公式 (2.6.10)，可以得到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{C}\boldsymbol{x} &= \boldsymbol{x} - \bar{\boldsymbol{J}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - \frac{1}{n}\mathbf{1}\mathbf{1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - \frac{1}{n}\bar{x}\mathbf{1} \\ &= [x_1 - \bar{x}, x_2 - \bar{x}, \cdots, x_n - \bar{x}]^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{2.6.12}$$

换言之，矩阵 $\boldsymbol{C}$ 对数据向量 $\boldsymbol{x}$ 的线性变换 $\boldsymbol{C}\boldsymbol{x}$ 是原数据向量的各个元素减去 n 个数据的均值的结果。这就是中心化矩阵的数学涵义所在。

此外，如果求向量 $\boldsymbol{C}\boldsymbol{x}$ 的内积，则有

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{x} &= [x_1 - \bar{x}, x_2 - \bar{x}, \cdots, x_n - \bar{x}][x_1 - \bar{x}, x_2 - \bar{x}, \cdots, x_n - \bar{x}]^{\mathrm{T}} \\ &= \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2\end{aligned}$$

但是，由式 (2.6.10) 知 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}$，故上式又可简化为

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n}(x_i - \bar{x})^2 \tag{2.6.13}$$

式右是我们熟悉的数据 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的协方差。即是说，一组数据的协方差可以用核矩阵为中心化矩阵的二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{x}$ 表示。

上述结果可以从数据向量推广到数据矩阵。考查 k 个通道的观测数据，它们的数据长度相同，均为 N，即第 j 个通道的观测数据为 $x_{1j}, x_{2j}, \cdots, x_{Nj}$，$j = 1, 2, \cdots, k$。收集 k 个通道的全部数据，组成观测数据矩阵

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{Nk} \end{bmatrix} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_k] \tag{2.6.14}$$

令 $\bar{x}_j$ 是第 j 个通道观测数据的均值，即

$$\bar{x}_j = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N} x_{ij} = \mathbf{1}_N^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\mathbf{1}_N, \quad j = 1, 2, \cdots, k \tag{2.6.15}$$

则 k 通道的均值向量为

$$\bar{\boldsymbol{x}} = [\bar{x}_1, \bar{x}_2, \cdots, \bar{x}_k]^{\mathrm{T}} = \frac{1}{N}(\mathbf{1}_N^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}} \tag{2.6.16}$$

各个通道的观测数据减去该通道的均值后，得到的新观测数据 $x_{1j}-\bar{x}_j, x_{2j}-\bar{x}_j, \cdots, x_{Nj}-\bar{x}_j$ 具有零均值。这一操作称为零均值化。各个通道的观测数据零均值化后，新的观测数据矩阵为

$$\tilde{\boldsymbol{X}} = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \cdots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \cdots & x_{2k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_{N1} & x_{N2} & \cdots & x_{Nk} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_k \\ \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_k \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \bar{x}_1 & \bar{x}_2 & \cdots & \bar{x}_k \end{bmatrix} = \boldsymbol{X} - \boldsymbol{1}\bar{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}} \tag{2.6.17}$$

第 j 列为

$$\begin{bmatrix} x_{1j}-\bar{x}_j \\ x_{2j}-\bar{x}_j \\ \vdots \\ x_{Nj}-\bar{x}_j \end{bmatrix} = \boldsymbol{x}_j - \frac{1}{N}\boldsymbol{J}_N\boldsymbol{x}_j = (\boldsymbol{I}-\bar{\boldsymbol{J}}_N)\boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{C}_N\boldsymbol{x}_j, \quad j=1,2,\cdots,k \tag{2.6.18}$$

由此得到

$$\tilde{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{C}_N\boldsymbol{X} \tag{2.6.19}$$

和

$$\sum_{i=1}^{N}(x_{ij}-\bar{x}_j)^2 = (\boldsymbol{C}_N\boldsymbol{x}_j)^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}_N\boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{x}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}_N\boldsymbol{x}_j \tag{2.6.20}$$

式中，利用了中心化矩阵的性质公式 (2.6.10)。

式 (2.6.20) 的矩阵形式为

$$\boldsymbol{S} = \tilde{\boldsymbol{X}}^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}_N\boldsymbol{X} \tag{2.6.21}$$

矩阵 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}_N\boldsymbol{X}$ 实际上是 k 个通道观测数据矩阵的协方差矩阵，在多变元统计分析中被称为 Wishart 矩阵 [411]。

2.6.2 对角加矩阵

令矩阵 $\boldsymbol{D}_{n\times n}$ 非奇异，$\boldsymbol{a}_{n\times 1}$ 和 $\boldsymbol{b}_{n\times 1}$ 为向量，并且 p 为标量。称

$$\boldsymbol{C} = \boldsymbol{D} + p\,\boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} d_{11}+p\,a_1b_1 & d_{12}+p\,a_1b_2 & \cdots & d_{1n}+p\,a_1b_n \\ d_{21}+p\,a_2b_1 & d_{22}+p\,a_2b_2 & \cdots & d_{2n}+p\,a_2b_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ d_{n1}+p\,a_nb_1 & d_{n2}+p\,a_nb_2 & \cdots & d_{nn}+p\,a_nb_n \end{bmatrix} \tag{2.6.22}$$

为对角加矩阵 (diagonal plus matrix)，式中，$p \neq -\left(\sum_{i=1}^{n}\frac{a_ib_i}{d_{ii}}\right)^{-1}$。

显然，矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的元素 c_{ij} 可以表示为

$$c_{ii} = d_{ii} + p\, a_i b_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n \quad (\text{主对角线})$$

$$c_{i,i+1} = d_{i,i+1} + p\, a_i b_{i+1}, \quad i = 1, 2, \cdots, n-1 \quad (\text{次对角线})$$

$$c_{i,i-1} = d_{i,i-1} + p\, a_i b_{i-1}, \quad i = 2, 3, \cdots, n \quad (\text{次对角线})$$

即 $\boldsymbol{C}$ 的主对角线和次对角线上的元素都服从一定的加法规则。这就是为什么称 $\boldsymbol{C}$ 为"对角加"矩阵的缘故。

运用矩阵求逆引理，不难求得对角加矩阵的逆矩阵为

$$\boldsymbol{C}^{-1} = (\boldsymbol{D} + p\, \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}})^{-1} = \boldsymbol{D}^{-1} + q\, \tilde{\boldsymbol{a}}\tilde{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}} \tag{2.6.23}$$

式中

$$\tilde{\boldsymbol{a}} = [\tilde{a}_1, \tilde{a}_2, \cdots, \tilde{a}_n]^{\mathrm{T}} \tag{2.6.24}$$

$$\tilde{\boldsymbol{b}} = [\tilde{b}_1, \tilde{b}_2, \cdots, \tilde{b}_n]^{\mathrm{T}} \tag{2.6.25}$$

$$q = -p\left(1 + p\sum_{i=1}^{n} a_i b_i / d_{ii}\right)^{-1} \tag{2.6.26}$$

其中，$\tilde{a}_i = a_i / d_{ii}$，$\tilde{b}_i = b_i / d_{ii}$。

下面介绍对角加矩阵在数理统计中的应用 [191]。

考虑 n 个随机变量 $x_1, x_2, \cdots, x_n$。令 p_i 为随机变量 x_i 的发生概率，即 $p_i > 0$，且 $\sum_{i=1}^{n} p_i < 1$。

令零均值的随机向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^{\mathrm{T}}$ 的方差－协方差矩阵为 $\boldsymbol{V} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\}$，则可以将它写成对角加矩阵形式，即有

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{V} &= \begin{bmatrix} p_1(1-p_1) & -p_1 p_2 & \cdots & -p_1 p_n \\ -p_2 p_1 & p_2(1-p_2) & \cdots & -p_2 p_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ -p_n p_1 & -p_n p_2 & \cdots & p_n(1-p_n) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} p_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & p_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & p_n \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_n \end{bmatrix} [p_1, p_2, \cdots, p_n] \\
&= \boldsymbol{D} + \beta\, \boldsymbol{a}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}
\end{aligned} \tag{2.6.27}$$

式中

$$\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(p_1, p_2, \cdots, p_n)$$

$$\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} = [p_1, p_2, \cdots, p_n]^{\mathrm{T}}$$

$$\beta = -1$$

在第 1 章的 Woodbury 公式 (1.7.12)

$$(\boldsymbol{A}+b\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}})^{-1}=\boldsymbol{A}^{-1}-\frac{b}{1+b\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{u}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{-1}$$

中，令 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{D}, b=\beta=-1$ 及 $\boldsymbol{u}=\boldsymbol{v}=\boldsymbol{a}=[p_1,p_2,\cdots,p_n]^{\mathrm{T}}$，则可以求出式 (2.6.27) 定义的方差 - 协方差矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的逆矩阵为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{V}^{-1}&=\boldsymbol{D}^{-1}+q\,\tilde{\boldsymbol{a}}\tilde{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}}\\&=\mathrm{diag}^{-1}(p_1,p_2,\cdots,p_n)+q\,\boldsymbol{J}\\&=\begin{bmatrix}p_1^{-1}&0&\cdots&0\\0&p_2^{-1}&\cdots&0\\\vdots&\vdots&\ddots&\vdots\\0&0&\cdots&p_n^{-1}\end{bmatrix}+q\begin{bmatrix}1&1&\cdots&1\\1&1&\cdots&1\\\vdots&\vdots&&\vdots\\1&1&\cdots&1\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}p_1^{-1}+q&q&\cdots&q\\q&p_2^{-1}+q&\cdots&q\\\vdots&\vdots&&\vdots\\q&q&\cdots&p_n^{-1}+q\end{bmatrix}\end{aligned}\tag{2.6.28}$$

式中，$q=\left(1-\sum_{i=1}^{n}p_i\right)^{-1}$。

借助中心化矩阵和对角加矩阵，可以简化数理统计和信号处理很多问题的描述。

2.7 相似矩阵与相合矩阵

本节讨论矩阵的两种特殊线性变换。变换后得到的矩阵与原矩阵之间存在某些有趣的关系。

2.7.1 相似矩阵

令 $\boldsymbol{S}\in C^{n\times n}$ 为非奇异矩阵，考查矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 的线性变换

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}\tag{2.7.1}$$

令线性变换 $\boldsymbol{B}$ 的特征值为 λ，对应的特征向量为 $\boldsymbol{y}$，即

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{y}=\lambda\boldsymbol{y}\tag{2.7.2}$$

将式 (2.7.1) 代入上式，即有 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}\boldsymbol{y}=\lambda\boldsymbol{y}$ 或

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{S}\boldsymbol{y})=\lambda(\boldsymbol{S}\boldsymbol{y})\tag{2.7.3}$$

若令 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{S}\boldsymbol{y}$ 或 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{x}$，则式 (2.7.3) 可以写作

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}\tag{2.7.4}$$

比较式 (2.7.2) 和式 (2.7.4) 知，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 具有相同的特征值，并且矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的特征向量 $\boldsymbol{y}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量 $\boldsymbol{x}$ 的线性变换，即 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{x}$。由于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 的特征值相同，特征向量存在线性变换的关系，所以称这两个矩阵“相似”。于是，有下面的数学定义。

定义 2.7.1 (相似矩阵与相似变换)　矩阵 $\boldsymbol{B}\in C^{n\times n}$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 的相似矩阵，若存在一非奇异矩阵 $\boldsymbol{S}\in C^{n\times n}$ 使得 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$。此时，线性变换 $\boldsymbol{A}\mapsto\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的相似变换。关系“$\boldsymbol{B}$ 相似于 $\boldsymbol{A}$”常简写作 $\boldsymbol{B}\sim\boldsymbol{A}$。

相似矩阵具有以下性质：

(1) 自反性：$\boldsymbol{A}\sim\boldsymbol{A}$，即任一矩阵与它自己相似。

(2) 对称性：若 $\boldsymbol{A}$ 相似于 $\boldsymbol{B}$，则 $\boldsymbol{B}$ 相似于 $\boldsymbol{A}$。

(3) 传递性：若 $\boldsymbol{A}\sim\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{B}\sim\boldsymbol{C}$，则 $\boldsymbol{A}\sim\boldsymbol{C}$。

证明　(1) 只要在式 (2.7.1) 中取 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{I}$，即可证明性质 (1)。

(2) 若 $\boldsymbol{A}$ 相似于 $\boldsymbol{B}$，则有 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{S}$。两边左乘 $\boldsymbol{S}$ 和右乘 $\boldsymbol{S}^{-1}$，即有 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{S}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}^{-1}$，即 $\boldsymbol{B}$ 相似于 $\boldsymbol{A}$。性质 (2) 得证。

(3) 设 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{T}$，则有

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{S}^{-1}(\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{T})\boldsymbol{S}=(\boldsymbol{T}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{C}(\boldsymbol{T}\boldsymbol{S})$$

这就证明了 $\boldsymbol{A}$ 相似于 $\boldsymbol{C}$。性质 (3) 得证。 ■

下面是关于相似矩阵的两个重要定理。

定理 2.7.1　令 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in C^{n\times n}$。若 $\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 相似，则 $\det(\boldsymbol{B})=\det(\boldsymbol{A})$ 和 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$，即相似矩阵的行列式相等，并具有相同的迹。

证明　对相似关系 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 分别运用行列式的性质，得

$$\begin{aligned}\det(\boldsymbol{B})&=\det(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S})\\&=\det(\boldsymbol{S}^{-1})\det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{S})\\&=\det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{S}^{-1})\det(\boldsymbol{S})\\&=\det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{S})\\&=\det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{I})\\&=\det(\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

利用迹的性质，又有

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{S}^{-1}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}))=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{-1})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$$

这就证明了本定理。 ■

定理 2.7.2　令 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in C^{n\times n}$。若 $\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 相似，则 $\boldsymbol{B}$ 的特征多项式 $\det(\boldsymbol{B}-z\boldsymbol{I})$ 与 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式 $\det(\boldsymbol{A}-z\boldsymbol{I})$ 相同。

证明 对任意 z，有

$$\begin{aligned}\det(\boldsymbol{B}-z\boldsymbol{I}) &= \det(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}-z\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{S}) \\ &= \det(\boldsymbol{S}^{-1}(\boldsymbol{A}-z\boldsymbol{I})\boldsymbol{S}) \\ &= \det(\boldsymbol{S}^{-1})\det(\boldsymbol{A}-z\boldsymbol{I})\det(\boldsymbol{S}) \\ &= (\det(\boldsymbol{S}))^{-1}\det(\boldsymbol{S})\det(\boldsymbol{A}-z\boldsymbol{I}) \\ &= \det(\boldsymbol{A}-z\boldsymbol{I})\end{aligned}$$

即定理得证。 ■

注意到一个矩阵的特征值定义为该矩阵的特征多项式的根，上述定理给出以下推论。

推论 2.7.1 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in C^{n\times n}$，并且 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 相似，则它们具有相同的特征值 (包括多重特征值在内)。

这个推论启发我们，如果想得到一个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，可以通过相似变换，使 $\boldsymbol{A}$ 的相似矩阵为三角矩阵。这样一来，该三角矩阵的对角元素便给出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征值 (包括多重度在内)。

下面是相似矩阵的重要性质。

(1) 相似矩阵 $\boldsymbol{B}\sim\boldsymbol{A}$ 具有相同的行列式，即 $|\boldsymbol{B}|=|\boldsymbol{A}|$。

(2) 若矩阵 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{T}$ (上三角矩阵)，则 $\boldsymbol{T}$ 的对角元素给出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ_i。

(3) 两个相似矩阵具有完全相同的特征值。

(4) 若 $\boldsymbol{A}$ 的特征值各不相同，则一定可以找到一相似矩阵 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{D}$ (对角矩阵)，其对角元素即是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值。

(5) $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与对角矩阵相似的充分必要条件是：矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个特征向量线性无关。

(6) 相似矩阵 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 意味着 $\boldsymbol{B}^2=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{S}$，从而有 $\boldsymbol{B}^k=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{S}$。就是说，若 $\boldsymbol{B}\sim\boldsymbol{A}$，则 $\boldsymbol{B}^k\sim\boldsymbol{A}^k$。这一性质称为相似矩阵的幂性质。

(7) 若矩阵 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 均可逆，则 $\boldsymbol{B}^{-1}=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{S}$，即当两个矩阵相似时，它们的逆矩阵也相似。

在相似变换中最重要的是酉相似变换。如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 经过酉矩阵相似变换为 $\boldsymbol{B}$，就称 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是酉相似的。例如，若 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 经过酉矩阵 $\boldsymbol{U}^{-1}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 相似变换为对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$，即有 $\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}$，则根据推论 2.7.1 知，Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与酉相似的对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 具有相同的特征值。这正是 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$ 的特征值分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 的理论基础。

2.7.2 相合矩阵

与相似矩阵在形式上部分相同的矩阵是相合矩阵。

定义 2.7.2 (相合矩阵与相合变换) 令 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}\in C^{n\times n}$，并且 $\boldsymbol{C}$ 非奇异，则矩阵

$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的相合矩阵 (congruent matrix)，而线性变换 $\boldsymbol{A}\mapsto\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}$ 称为相合变换。

相合矩阵具有以下特性。

(1) 自反性：$\boldsymbol{A}$ 相合于 $\boldsymbol{A}$，即任一矩阵与它自己相合。

(2) 对称性：若 $\boldsymbol{A}$ 相合于 $\boldsymbol{B}$，则 $\boldsymbol{B}$ 相合于 $\boldsymbol{A}$。

(3) 传递性：若 $\boldsymbol{A}$ 相合于 $\boldsymbol{B}$，而 $\boldsymbol{B}$ 又相合于 $\boldsymbol{D}$，则 $\boldsymbol{A}$ 相合于 $\boldsymbol{D}$。

证明 对于相合而言：

(1) 若取 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{I}$，则显然有 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}=\boldsymbol{A}$ 相合。特性 (1) 得证。

(2) 若 $\boldsymbol{A}$ 相合于 $\boldsymbol{B}$，即 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}$，则有

$$\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}^{-1}=(\boldsymbol{C}^{-1})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}^{-1}=\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T}$$

式中，$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{C}^{-1}$ 为非奇异矩阵。上式表明，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 相合于 $\boldsymbol{A}$。特性 (2) 得证。

(3) 若 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{C}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}_1$ 和 $\boldsymbol{D}=\boldsymbol{C}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}_2$，则

$$\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{C}_1^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{C}_1^{-1}=(\boldsymbol{C}_1^{\mathrm{H}})^{-1}[(\boldsymbol{C}_2^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{D}\boldsymbol{C}_2^{-1}]\boldsymbol{C}_1^{-1}=\left[(\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}_2)^{-1}\right]^{\mathrm{H}}\boldsymbol{D}\,(\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}_2)^{-1}$$

即 $\boldsymbol{A}$ 相合于 $\boldsymbol{D}$，因为 $\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{C}_2$ 非奇异。特性 (3) 得证。 ■

对于一个 $n\times n$ 维 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$，存在一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{T}$，使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{T}\boldsymbol{D}\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}$，其中，$\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_n)$ 是对角矩阵，并且对角元素 d_i 只取 $+1,-1$ 和 0 这 3 种值，它们分别与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的正特征值、负特征值和零特征值相对应。此时，称 $\boldsymbol{T}\boldsymbol{D}\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的相合规范型 (congruent canonical form)，而对角矩阵 $\boldsymbol{D}$ 则称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的规范相合矩阵 (canonical congruent matrix)。

术语"相合"具有以下两层涵义：

(1) 两个相合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的二次型函数相吻合。考查二次型函数 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$。若令 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{C}\boldsymbol{y}$，其中，$\boldsymbol{C}$ 为非奇异矩阵，则有

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{y} \tag{2.7.5}$$

式中，$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{C}$。这表明，两个相合矩阵具有相同的二次型函数。

(2) Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的规范相合矩阵 $\boldsymbol{D}$ 与酉相似对角化矩阵 (特征值矩阵) $\boldsymbol{\Sigma}$ 的元素具有以下关系：零元素的个数相同，对应的非零元素具有相同的符号。

2.8 Vandermonde 矩阵与 Fourier 矩阵

本节考查每行元素组成一个等比序列的两类特殊矩阵，它们是 Vandermonde 矩阵和 Fourier 矩阵，在信号处理中有着广泛的应用。事实上，Fourier 矩阵是 Vandermonde 矩阵的一种特例。因此，下面先介绍 Vandermonde 矩阵。

2.8.1 Vandermonde 矩阵

$n \times n$ 维 Vandermonde 矩阵是取以下特殊形式的矩阵:

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{n-1} \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \cdots & x_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & x_n^2 & \cdots & x_n^{n-1} \end{bmatrix} \tag{2.8.1}$$

或

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_1 & x_2 & \cdots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \cdots & x_n^2 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \cdots & x_n^{n-1} \end{bmatrix} \tag{2.8.2}$$

即矩阵每行 (或列) 的元素组成一个等比序列。

Vandermonde 矩阵有一个突出的性质: n 个参数 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 各异时, Vandermonde 矩阵非奇异。为此, 需要证明行列式 $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$, $x_i \neq x_j, \forall\, i \neq j$。最简单的方法莫过于直接评价 Vandermonde 矩阵的行列式 [36, p.193]。显然, 可以将 $\det(\boldsymbol{A})$ 视为 x_1 的 $n-1$ 阶多项式。作为一个 $n-1$ 阶多项式, $\det(\boldsymbol{A})$ 有根 $x_1 = x_2, x_1 = x_3, \cdots, x_1 = x_n$, 因为每当矩阵的两行 (或列) 相同时, 行列式等于零。于是, 可以将行列式表示为

$$\det(\boldsymbol{A}) = (x_2 - x_1)(x_3 - x_1)\cdots(x_n - x_1)q(x_2, q_3, \cdots, x_n)$$

式中, $q(x_2, x_3, \cdots, x_n)$ 是一个只与 $x_2, x_3, \cdots, x_n$ 有关的多项式。类似地, 行列式 $\det(\boldsymbol{A})$ 也可以分别视为关于 $x_2, x_3, \cdots, x_n$ 的 $n-1$ 阶多项式。于是, 可将 Vandermonde 矩阵的行列式用多项式形式表示为

$$\det(\boldsymbol{A}) = \prod_{1 \leqslant j < i \leqslant n} (x_i - x_j)\phi(x_1, x_2, \cdots, x_n)$$

式中, ϕ 是关于 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的多项式。由于行列式 $\det(\boldsymbol{A})$ 中 x_i 的阶数为 n, 所以 ϕ 必定为常数项, 不可能与任何 x_i 有关。特别地, 当 $n = 2$ 时, Vandermonde 矩阵的行列式 $\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ x_1 & x_2 \end{vmatrix} = x_2 - x_1$。由此知 $\phi = 1$。因此, $n \times n$ 维 Vandermonde 矩阵的行列式由

$$\det(\boldsymbol{A}) = \prod_{i,j=1,\, i>j}^{n} (x_i - x_j) \tag{2.8.3}$$

给出 [36, p.193]。显然, 若 $x_i \neq x_j, \forall\, i \neq j$, 则 $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$, 即 Vandermonde 矩阵非奇异。

在插值问题中, 通常需要求最高阶次为 $n-1$ 次的多项式 $p(x) = a_{n-1}x^{n-1} + a_{n-2}x^{n-2} +$

$\cdots + a_1x + a_0$，并要求它满足

$$\left.\begin{aligned}p(x_1) &= a_0 + a_1x_1 + a_2x_1^2 + \cdots + a_{n-1}x_1^{n-1} = y_1\\ p(x_2) &= a_0 + a_1x_2 + a_2x_2^2 + \cdots + a_{n-1}x_2^{n-1} = y_2\\ &\cdots\\ p(x_n) &= a_0 + a_1x_n + a_2x_n^2 + \cdots + a_{n-1}x_n^{n-1} = y_n\end{aligned}\right\} \tag{2.8.4}$$

其中，$x_1, x_2, \cdots, x_n$ 和 $y_1, y_2, \cdots, y_n$ 为已知。插值条件 (2.8.4) 是一组线性方程，共有 n 个方程和 n 个未知系数 $a_0, a_1, \cdots, a_{n-1}$。方程组可写作 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{y}$，其中，$\boldsymbol{a} = [a_0, a_1, \cdots, a_{n-1}]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{y} = [y_1, y_2, \cdots, y_n]^{\mathrm{T}}$，且矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是如式 (2.8.1) 所示的 Vandermonde 矩阵。若数据点 x_1、$x_2, \cdots, x_n$ 各不相同，则插值问题总有一个解，因为 $\boldsymbol{A}$ 在这种情况下是非奇异的。

在信号处理中经常遇到是另一形式的 Vandermonde 矩阵。

例 2.8.1 (扩展 Prony 方法) 在谐波恢复的扩展 Prony 方法中，信号模型假定是一组 p 个指数函数的叠加，这组指数函数有任意的辐值、相位、频率和阻尼因子。于是，离散时间的数学模型

$$\hat{x}_n = \sum_{i=1}^{p} b_i z_i^n, \qquad n = 0, 1, \cdots, N-1 \tag{2.8.5}$$

被用作拟合观测数据 $x_0, x_1, \cdots, x_{N-1}$ 的数学模型。通常，b_i 和 z_i 假定为复数，并且

$$b_i = A_i \exp(\mathrm{j}\,\theta_i), \quad z_i = \exp[(\alpha_i + \mathrm{j}\,2\pi f_i)\Delta t]$$

其中，A_i 是幅值，θ_i 是相位 (弧度)，α_i 为阻尼因子，f_i 为振荡频率 (Hz)，Δt 代表采样间隔 (秒)。式 (2.8.5) 的矩阵形式是

$$\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{b} = \hat{\boldsymbol{x}}$$

其中，$\boldsymbol{b} = [b_0, b_1, \cdots, b_p]^{\mathrm{T}}$，$\hat{\boldsymbol{x}} = [\hat{x}_0, \hat{x}_1, \cdots, \hat{x}_{N-1}]^{\mathrm{T}}$，

$$\boldsymbol{\Phi} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1\\ z_1 & z_2 & z_3 & \cdots & z_p\\ z_1^2 & z_2^2 & z_3^2 & \cdots & z_p^2\\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ z_1^{N-1} & z_2^{N-1} & z_3^{N-1} & \cdots & z_p^{N-1}\end{bmatrix} \tag{2.8.6}$$

$\boldsymbol{\Phi}$ 为 Vandermonde 矩阵。注意，Vandermonde 矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 的每列元素组成一等比序列。这一结构与每行元素组成等比序列的 Vandermonde 矩阵不同。

由于每列具有等比序列结构，显然，当且仅当 $z_1, z_2, \cdots, z_p$ 各不相同时，式 (2.8.6) 的 Vandermonde 矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 的各列是两两线性无关的，即 Vandermonde 矩阵满列秩。

使平方误差 $\epsilon = \sum_{n=1}^{N-1} |x_n - \hat{x}_n|^2$ 最小，便得到最小二乘解

$$\boldsymbol{b} = [\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Phi}]^{-1}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} \tag{2.8.7}$$

容易证明，式 (2.8.7) 中的 $\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Phi}$ 的计算可以大大简化，使得无需作 Vandermonde 矩阵的乘法运算，就能够直接利用

$$\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Phi}=\begin{bmatrix}\gamma_{11} & \gamma_{12} & \cdots & \gamma_{1p}\\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \cdots & \gamma_{2p}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \gamma_{p1} & \gamma_{p2} & \cdots & \gamma_{pp}\end{bmatrix} \tag{2.8.8}$$

计算出 $\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Phi}$，其中

$$\gamma_{ij}=\frac{(z_i^*z_j)^N-1}{(z_i^*z_j)-1} \tag{2.8.9}$$

式 (2.8.6) 所示的 $N\times p$ 矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 是在信号处理中广泛应用的 Vandermonde 矩阵之一。信号处理中另外一种与式 (2.8.6) 类似的 Vandermonde 矩阵为

$$\boldsymbol{\Phi}=\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ \mathrm{e}^{\lambda_1} & \mathrm{e}^{\lambda_2} & \cdots & \mathrm{e}^{\lambda_d}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \mathrm{e}^{\lambda_1(N-1)} & \mathrm{e}^{\lambda_2(N-1)} & \cdots & \mathrm{e}^{\lambda_d(N-1)}\end{bmatrix} \tag{2.8.10}$$

在信号重构、系统辨识和其他一些信号处理问题中，需要对 Vandermonde 矩阵求逆。考虑下列 $n\times n$ 复 Vandermonde 矩阵：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_1^{n-1} & a_2^{n-1} & \cdots & a_n^{n-1}\end{bmatrix},\qquad a_k\in C \tag{2.8.11}$$

记 $\det(\boldsymbol{A})=V_n(a_1,a_2,\cdots,a_n)$，则

$$V_n(a_1,a_2,\cdots,a_n)=\prod_{1\leqslant j\leqslant i\leqslant n}(a_i-a_j) \tag{2.8.12}$$

下面推导 $V_n(a_1,a_2,\cdots,a_n)$ 的表达式。对于 $1\leqslant k\leqslant n-1$，考虑行列式

$$V_n^k(a_1,a_2,\cdots,a_n)=\begin{vmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_1^{k-1} & a_2^{k-1} & \cdots & a_n^{k-1}\\ a_1^{k+1} & a_2^{k+1} & \cdots & a_n^{k+1}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_1^n & a_2^n & \cdots & a_n^n\end{vmatrix} \tag{2.8.13}$$

若 $k=0$，则定义

$$V_n^0(a_1,a_2,\cdots,a_n)=\begin{vmatrix}a_1 & a_2 & \cdots & a_n\\ a_1^2 & a_2^2 & \cdots & a_n^2\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_1^n & a_2^n & \cdots & a_n^n\end{vmatrix} \tag{2.8.14}$$

当 $k=n$ 时，定义

$$V_n^n(a_1,a_2,\cdots,a_n)=\begin{vmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_1^{n-1} & a_2^{n-1} & \cdots & a_n^{n-1}\end{vmatrix} \tag{2.8.15}$$

根据以上定义，显然有

$$V_n^n(a_1,a_2,\cdots,a_n)=V_n(a_1,a_2,\cdots,a_n) \tag{2.8.16}$$

进一步地，我们来考虑 $(n+1)\times(n+1)$ Vandermonde 矩阵：

$$V_{n+1}(a_1,a_2,\cdots,a_n,z)=\begin{vmatrix}1 & 1 & \cdots & 1 & 1\\ a_1 & a_2 & \cdots & a_n & z\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots\\ a_1^n & a_2^n & \cdots & a_n^n & z^n\end{vmatrix} \tag{2.8.17}$$

其中，z 为一复变量。容易证明

$$V_{n+1}(a_1,a_2,\cdots,a_n,z)=V_n(a_1,a_2,\cdots,a_n)\times\prod_{i=1}^{n}(z-a_i) \tag{2.8.18}$$

另一方面，对最后一列应用 Laplace 展开，则有

$$\begin{aligned}V_{n+1}(a_1,a_2,\cdots,a_n,z)=&V_n^n(a_1,a_2,\cdots,a_n)z^n-V_n^{n-1}(a_1,a_2,\cdots,a_n)z^{n-1}+\\ &\cdots+(-1)^nV_n^0(a_1,a_2,\cdots,a_n)\end{aligned} \tag{2.8.19}$$

考虑 k $(0\leqslant k\leqslant n)$ 阶多项式，它们具有变量 $a_1,a_2,\cdots,a_n$，即

$$\left.\begin{aligned}&\sigma_0(a_1,a_2,\cdots,a_n)=1\\ &\sigma_1(a_1,a_2,\cdots,a_n)=a_1+a_2+\cdots+a_n\\ &\sigma_2(a_1,a_2,\cdots,a_n)=a_1a_2+\cdots+a_1a_n+a_2a_3+\cdots+a_2a_n+\cdots+a_{n-1}a_n\\ &\qquad\qquad\cdots\\ &\sigma_n(a_1,a_2,\cdots,a_n)=a_1a_2\cdots a_n\end{aligned}\right\} \tag{2.8.20}$$

于是

$$\begin{aligned}\prod_{i=1}^{n}(z-a_i)=&\sigma_0(a_1,a_2,\cdots,a_n)z^n-\sigma_1(a_1,a_2,\cdots,a_n)z^{n-1}+\\ &\cdots+(-1)^n\sigma_n(a_1,a_2,\cdots,a_n)\end{aligned} \tag{2.8.21}$$

综合式 (2.8.18) ~ 式 (2.8.21) 得到

$$V_n^k(a_1,a_2,\cdots,a_n)=V_n(a_1,a_2,\cdots,a_n)\sigma_{n-k}(a_1,a_2,\cdots,a_n),\quad 0\leqslant k\leqslant n \tag{2.8.22}$$

若令 $A_{ij}\ (1 \leqslant j \leqslant n, 1 \leqslant i \leqslant n)$ 是 Vandermonde 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与元素 a_j^{i-1} 对应的余子式，则有

$$A_{ij} = (-1)^{i+j} V_{n-1}^{i-1}(a_1, \cdots, a_{j-1}, a_{j+1}, \cdots, a_n) \tag{2.8.23}$$

将式 (2.8.22) 代入式 (2.8.23) 得

$$A_{ij} = (-1)^{i+j} V_{n-1}(a_1, \cdots, a_{j-1}, a_{j+1}, \cdots, a_n) \sigma_{n-i}(a_1, \cdots, a_{j-1}, a_{j+1}, \cdots, a_n) \tag{2.8.24}$$

因而

$$\frac{A_{ij}}{V_n(a_1, a_2, \cdots, a_n)} = (-1)^{i+j} \frac{\sigma_{n-i}(a_1, \cdots, a_{j-1}, a_{j+1}, \cdots, a_n)}{\prod\limits_{k=1}^{j-1}(a_j - a_k) \prod\limits_{k=j+1}^{n}(a_k - a_j)} \tag{2.8.25}$$

于是，Vandermonder 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵的 (i,j) 元素可以表示为

$$A^{-1}(i,j) = (-1)^{i+j} \frac{\sigma_{n-i}(a_1, \cdots, a_{j-1}, a_{j+1}, \cdots, a_n)}{\prod\limits_{k=1}^{j-1}(a_j - a_k) \prod\limits_{k=j+1}^{n}(a_k - a_j)}, \quad i,j = 1,2,\cdots,n \tag{2.8.26}$$

显然，式 (2.8.26) 也可以等价写作

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \begin{bmatrix} \dfrac{\sigma_{n-1}(a_2, a_3, \cdots, a_n)}{\prod\limits_{k=2}^{n}(a_k - a_1)} & -\dfrac{\sigma_{n-2}(a_2, a_3, \cdots, a_n)}{\prod\limits_{k=2}^{n}(a_k - a_1)} & \cdots & \dfrac{(-1)^{n+1}}{\prod\limits_{k=2}^{n}(a_k - a_1)} \\ -\dfrac{\sigma_{n-1}(a_1, a_3, \cdots, a_n)}{(a_2 - a_1)\prod\limits_{k=3}^{n}(a_k - a_2)} & \dfrac{\sigma_{n-2}(a_1, a_3, \cdots, a_n)}{(a_2 - a_1)\prod\limits_{k=3}^{n}(a_k - a_2)} & \cdots & \dfrac{(-1)^{n+2}}{(a_2 - a_1)\prod\limits_{k=3}^{n}(a_k - a_2)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\sigma_{n-1}(a_1, a_2, \cdots, a_{n-1})}{(-1)^{n+1}\prod\limits_{k=1}^{n-1}(a_n - a_k)} & \dfrac{\sigma_{n-2}(a_1, a_2, \cdots, a_{n-1})}{(-1)^{n+2}\prod\limits_{k=1}^{n-1}(a_n - a_k)} & \cdots & \dfrac{1}{\prod\limits_{k=1}^{n-1}(a_n - a_k)} \end{bmatrix} \tag{2.8.27}$$

这表明，可以根据 Vandermonde 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的元素直接计算逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$。这一求逆公式是文献 [328] 推导的。

2.8.2 Fourier 矩阵

特别地，考虑一个 $N \times N$ 特殊 Vandermonde 矩阵。在式 (2.8.1) 中令 $x_i = w^{i-1}$，$i = 1,2,\cdots,N$，若取 $w = \mathrm{e}^{-\mathrm{j}\,2\pi/N}$，则有

$$\boldsymbol{F} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & w & w^2 & \cdots & w^{N-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & w^{N-1} & w^{2(N-1)} & \cdots & w^{(N-1)(N-1)} \end{bmatrix}, \quad w = \mathrm{e}^{-\mathrm{j}\,2\pi/N} \tag{2.8.28}$$

具有这种特殊结构的矩阵称为 Fourier 矩阵。显然，Fourier 矩阵的 (i,k) 元素为 $F(i,k)=w^{(i-1)(k-1)}$。

离散时间信号 $x(0),x(1),\cdots,x(N-1)$ 的 Fourier 变换称为离散 Fourier 变换 (DFT)，定义为

$$\hat{x}(k)=\sum_{n=0}^{N-1}x(n)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\,2\pi nk/N}=\sum_{n=0}^{N-1}x(n)w^{nk},\quad k=0,1,\cdots,N-1 \tag{2.8.29}$$

写成矩阵形式，有

$$\begin{bmatrix}\hat{x}(0)\\ \hat{x}(1)\\ \vdots\\ \hat{x}(N-1)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & \cdots & 1\\ 1 & w & w^2 & \cdots & w^{N-1}\\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ 1 & w^{N-1} & w^{2(N-1)} & \cdots & w^{(N-1)(N-1)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x(0)\\ x(1)\\ \vdots\\ x(N-1)\end{bmatrix} \tag{2.8.30}$$

或简记作

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{F}\boldsymbol{x} \tag{2.8.31}$$

式中

$$\boldsymbol{x}=[x(0),x(1),\cdots,x(N-1)]^{\mathrm{T}} \tag{2.8.32}$$

$$\hat{\boldsymbol{x}}=[\hat{x}(0),\hat{x}(1),\cdots,\hat{x}(N-1)]^{\mathrm{T}} \tag{2.8.33}$$

分别是离散时间信号向量和其频谱向量 (一个信号的 Fourier 变换常称为该信号的频谱)。

以上分析表明，一个离散时间信号向量的离散 Fourier 变换可以用矩阵 $\boldsymbol{F}$ 表示。这就是为什么称矩阵 $\boldsymbol{F}$ 为 Fourier 矩阵的缘故。

根据定义易知

$$\boldsymbol{F}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}=\boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^{\mathrm{H}}=N\boldsymbol{I} \tag{2.8.34}$$

利用式 (2.8.34) 之结果，容易证明离散 Fourier 反变换也可以用 Fourier 矩阵表示。为此，用 Fourier 矩阵的复共轭转置左乘式 (2.8.31) 两边，得到 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{F}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}\hat{\boldsymbol{x}}$，然后代入 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{F}=N\boldsymbol{I}$，立即有

$$\boldsymbol{x}=\frac{1}{N}\boldsymbol{F}^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{x}} \tag{2.8.35}$$

或写作

$$\begin{bmatrix}x(0)\\ x(1)\\ \vdots\\ x(N-1)\end{bmatrix}=\frac{1}{N}\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & \cdots & 1\\ 1 & w^* & (w^2)^* & \cdots & (w^{N-1})^*\\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ 1 & (w^{N-1})^* & (w^{2(N-1)})^* & \cdots & (w^{(N-1)(N-1)})^*\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\hat{x}(0)\\ \hat{x}(1)\\ \vdots\\ \hat{x}(N-1)\end{bmatrix} \tag{2.8.36}$$

即有

$$x(n)=\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\hat{x}(k)\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,2\pi nk/N},\quad n=0,1,\cdots,N-1 \tag{2.8.37}$$

这恰好就是离散 Fourier 反变换的公式。

式 (2.8.31) 和式 (2.8.37) 一起组成非对称形式的 Fourier 变换对。

在有些文献 (例如 [290]) 中，Fourier 矩阵定义为

$$\boldsymbol{F}=\frac{1}{\sqrt{N}}\begin{bmatrix}1 & 1 & 1 & \cdots & 1\\ 1 & w & w^2 & \cdots & w^{N-1}\\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ 1 & w^{N-1} & w^{2(N-1)} & \cdots & w^{(N-1)(N-1)}\end{bmatrix},\qquad w=\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\,2\pi/N} \tag{2.8.38}$$

这一定义导出对称形式的离散 Fourier 变换对

$$\hat{x}(k)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{n=0}^{N-1}x(n)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\,2\pi nk/N},\quad k=0,1,\cdots,N-1 \tag{2.8.39}$$

$$x(n)=\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k=0}^{N-1}\hat{x}(k)\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,2\pi nk/N},\quad n=0,1,\cdots,N-1 \tag{2.8.40}$$

根据定义，容易证明 $n\times n$ 阶 Fourier 矩阵具有以下性质 [290]。

(1) Fourier 矩阵为对称矩阵，即 $\boldsymbol{F}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{F}$。

(2) Fourier 矩阵的逆矩阵等于 Fourier 矩阵的共轭矩阵，即 $\boldsymbol{F}^{-1}=\boldsymbol{F}^{*}$。

(3) $\boldsymbol{F}^2=\boldsymbol{P}=[\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_n,\boldsymbol{e}_{n-1},\cdots,\boldsymbol{e}_2]$ (置换矩阵)，其中，$\boldsymbol{e}_k$ 是标准向量 (仅第 k 个元素为 1，其他元素皆为 0 的向量)。

(4) $\sqrt{n}\boldsymbol{F}=\boldsymbol{C}+\mathrm{j}\boldsymbol{S}$，其中，矩阵 $\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 的第 i 行和第 j 列的元素分别为

$$C_{ij}=\cos\left(\frac{2\pi}{n}(i-1)(j-1)\right)$$

$$S_{ij}=\sin\left(\frac{2\pi}{n}(i-1)(j-1)\right)$$

式中，$i,j=1,2,\cdots,n$。

(5) $\boldsymbol{F}^4=\boldsymbol{I}$。

(6) $\boldsymbol{CS}=\boldsymbol{SC}$ 和 $\boldsymbol{C}^2+\boldsymbol{S}^2=\boldsymbol{I}$。

除了 2.1 节介绍的两种循环矩阵外，一个 $n\times n$ 矩阵

$$\boldsymbol{C}_n=\begin{bmatrix}c_0 & c_{-1} & \cdots & c_{1-n}\\ c_1 & c_0 & \cdots & c_{2-n}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ c_{n-1} & c_{n-2} & \cdots & c_0\end{bmatrix} \tag{2.8.41}$$

也称为循环矩阵，式中，$c_{-k}=c_{n-k},k=1,2,\cdots,n-1$。有趣的是，这类循环矩阵可以被 Fourier 矩阵对角化，即有 [107, p.73],[77]

$$\boldsymbol{C}_n=\boldsymbol{F}_n^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Lambda}_n\boldsymbol{F}_n \tag{2.8.42}$$

式中，$n\times n$ 维 Fourier 矩阵 $\boldsymbol{F}_n$ 的元素为

$$[\boldsymbol{F}_n]_{ik}=\frac{1}{\sqrt{n}}\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,2\pi ik/n},\qquad 0\leqslant i,k\leqslant n-1 \tag{2.8.43}$$

且 $\boldsymbol{A}_n$ 是一个 $n\times n$ 对角矩阵，其对角元素为循环矩阵 $\boldsymbol{C}_n$ 的特征值。值得指出的是，循环矩阵 $\boldsymbol{C}_n$ 的特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 可以利用 $\boldsymbol{C}_n$ 的第 1 列元素 $c_0,c_1,\cdots,c_{n-1}$ 的离散 Fourier 变换得到，即有 [77]

$$\lambda_k=\sum_{i=0}^{n-1}c_i\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,2\pi ik/n},\qquad k=0,1,\cdots,n-1 \tag{2.8.44}$$

并且这一运算可以利用快速 Fourier 变换 (FFT) 实现。

2.9 Hankel 矩阵

正方矩阵 $\boldsymbol{A}\in \boldsymbol{C}^{(n+1)\times(n+1)}$ 称为 Hankel 矩阵，若

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix} a_0 & a_1 & a_2 & \cdots & a_n\\ a_1 & a_2 & a_3 & \cdots & a_{n+1}\\ a_2 & a_3 & a_4 & \cdots & a_{n+2}\\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_n & a_{n+1} & a_{n+2} & \cdots & a_{2n}\end{bmatrix} \tag{2.9.1}$$

显然，只要序列 $a_0,a_1,\cdots,a_{2n-1},a_{2n}$ 给定，Hankel 矩阵的一般项就由 $a_{ij}=a_{i+j-2}$ 规定。事实上，Hankel 矩阵是一个交叉对角线上具有相同元素的矩阵。

假定给出了一系列复数 $s_0,s_1,s_2,\cdots$，它们定义了一个无穷阶对称矩阵

$$\boldsymbol{S}=\begin{bmatrix} s_0 & s_1 & s_2 & \cdots\\ s_1 & s_2 & s_3 & \cdots\\ s_2 & s_3 & s_4 & \cdots\\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots\end{bmatrix} \tag{2.9.2}$$

称矩阵 $\boldsymbol{S}$ 为无穷阶 Hankel 矩阵，并简记作 $\boldsymbol{S}=[s_{i+k}]_0^\infty$。在第 1 章中讨论过的 Hankel 算子实际上就是无穷阶 Hankel 矩阵。

下面的定理给出了无穷阶 Hankel 矩阵具有有限秩的充分必要条件。

定理 2.9.1 [166] 无穷阶 Hankel 矩阵 $\boldsymbol{S}=[s_{i+k}]_0^\infty$ 具有有限秩 r，当且仅当存在 r 个常数 $\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_r$，使得

$$s_l=\sum_{i=1}^{r}\alpha_i s_{l-i},\qquad l=r,r+1,\cdots \tag{2.9.3}$$

成立，其中，r 是具有该性质的最小整数。

证明 如果矩阵 $\boldsymbol{S}=[s_{i+k}]_0^\infty$ 具有有限秩 r，那么该矩阵的前 $r+1$ 行 $\gamma_1,\gamma_2,\cdots,\gamma_{r+1}$ 是线性相关的。因此，存在一个正整数 $h\leqslant r$ 使得行 $\gamma_1,\gamma_2,\cdots,\gamma_h$ 是线性无关的，但行 γ_{h+1} 是这些行的线性组合，即

$$\gamma_{h+1}=\sum_{i=1}^{\mathrm{H}}\alpha_i\gamma_{h-i+1}$$

现在考虑行 $\gamma_{l+1},\gamma_{l+2},\cdots,\gamma_{l+h+1}$，其中，$l$ 是一任意非负整数。由 Hankel 矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的结构显而易见，这些行可以通过"压缩"前面的 $h+1$ 行得到。具体说来，就是删去前 $l+1$ 列的元素，得到

$$\gamma_{l+h+1}=\sum_{i=1}^{H}\alpha_i\gamma_{l+h-i+1},\qquad l=0,1,2,\cdots$$

这样一来，矩阵 $\boldsymbol{S}$ 第 h 行以后的任意行都可以表示为其前面 h 行的线性组合，直至最前面 h 行的线性组合。注意，最前面 h 行是线性无关的。由此可以得出结论：矩阵的秩 r 是 h。如果 h 用 r 代替，并详细写出线性关系 $\gamma_{l+h+1}=\sum_{i=1}^{h}\alpha_i\gamma_{l+h-i+1}$ 的话，则得到式 (2.9.3)。反之，若条件式 (2.9.3) 满足，则矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的任意行 (或列) 就是 $\boldsymbol{S}$ 最前面 r 行 (或列) 的线性组合。因此，矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的所有阶数大于 r 的余子式均等于零，并且矩阵 $\boldsymbol{S}$ 有秩 $h\leqslant r$。然而，这一秩不可能小于 r，因为这意味着，式 (2.9.3) 的关系对一个比 r 小的值也成立，而这是与定理的假定条件相矛盾的。 ■

推论 2.9.1 如果无穷阶 Hankel 矩阵 $\boldsymbol{S}$ 具有有限秩 r，则 $D_r=\det[s_{i+k}]_0^{r-1}\neq 0$。

事实上，从关系式 (2.9.3) 可以得出结论：矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的任意行 (或列) 都是最前面 r 行 (或列) 的线性组合。因此，阶数为 r 的任意余子式都可以用形式 αD_r 表示，其中，α 是某个常数。由此可得不等式 $D_r\neq 0$。注意，对于一个秩 r 的有穷阶 Hankel 矩阵，$D_r\neq 0$ 有可能不成立。例如，元素 $s_0=s_1=0$，但 $s_2\neq 0$ 的矩阵

$$\boldsymbol{S}_2=\begin{bmatrix}s_0 & s_1\\ s_1 & s_2\end{bmatrix}$$

的秩等于 1，但是同时 $D_1=s_0=0$。

下面讨论无穷阶 Hankel 矩阵与有理式函数之间的联系。

假定存在一本征有理式函数 $R(z)=g(z)/h(z)$，其中

$$h(z)=a_0z^m+a_1z^{m-1}+\cdots+a_{m-1}z+a_m \tag{2.9.4}$$

$$g(z)=b_0z^m+b_1z^{m-1}+\cdots+b_{m-1}z+b_m \tag{2.9.5}$$

现在将函数 $R(z)$ 写作 z 的负次幂的幂级数：

$$R(z)=\frac{g(z)}{h(z)}=s_0+s_1z^{-1}+s_2z^{-2}+\cdots$$

如果函数 $R(z)$ 的所有极点 (也就是满足 $R(z)\to\infty$ 的所有 z 值) 都位于半径为 a 的圆内，即 $|z|\leqslant a$，则上述级数对于 $|z|>a$ 收敛。用分母 $h(z)$ 同乘上式的两边，得到

$$\begin{aligned}&(a_0z^m+a_1z^{m-1}+\cdots+a_{m-1}z+a_m)(s_0+s_1z^{-1}+s_2z^{-2}+\cdots)\\&=b_0z^m+b_1z^{m-1}+\cdots+b_{m-1}z+b_m\end{aligned} \tag{2.9.6}$$

比较上式两边 z 的同次幂项的系数，便得到下列的一组关系：

$$\left.\begin{aligned} a_0s_0 &= b_0 \\ a_0s_1 + a_1s_0 &= b_1 \\ &\cdots \\ a_0s_m + a_1s_{m-1} + \cdots + a_ms_0 &= b_m \end{aligned}\right\} \tag{2.9.7}$$

$$a_0s_l + a_1s_{l-1} + \cdots + a_ms_{l-m} = 0, \qquad l = m, m+1, \cdots \tag{2.9.8}$$

令 $\alpha_i = -a_i/a_0, i = m, m+1, \cdots$，我们就可以用式 (2.9.3) 书写关系式 (2.9.8)，其中，$r = m$。因此，根据定理 2.9.1，具有系数 $s_0, s_1, s_2, \cdots$ 的无穷 Hankel 矩阵 $\boldsymbol{S} = [s_{i+k}]_0^{\infty}$ 的秩为有限大 ($\leqslant m$)。

相反，如果矩阵 $\boldsymbol{S}$ 具有有限的秩，则式 (2.9.3) 成立，这些方程可以用式 (2.9.8) 重写，其中，$m = r$。于是，如果利用式 (2.9.7) 定义一组数 $b_0, b_1, \cdots, b_m$，便得到关系式

$$\frac{b_0z^m + b_1z^{m-1} + \cdots + b_m}{a_0z^m + a_1z^{m-1} + \cdots + a_m} = s_0 + s_1z^{-1} + s_2z^{-2} + \cdots$$

此关系式得以成立的分母最小阶数 m 就是式 (2.9.3) 成立的最小数 m。根据定理 2.9.1，这个最小的 m 值等于矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的秩。上述结果可以用下面的定理来表述。

定理 2.9.2 [166] 矩阵 $\boldsymbol{S} = [s_{i+k}]_0^{\infty}$ 具有有限大的秩，当且仅当级数

$$R(z) = s_0 + s_1z^{-1} + s_2z^{-2} + \cdots$$

是变量 z 的有理式函数。当这种情况发生时，矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的秩等于函数 $R(z)$ 的极点个数，其中包括极点的多重度在内。

运用定理 2.9.2，可以得到有关 ARMA 模型的一个重要结果。

例 2.9.1 令一线性时不变的因果 ARMA 过程由

$$\sum_{i=0}^{p} a(i)x(n-i) = \sum_{j=0}^{q} b(j)e(n-j) \tag{2.9.9}$$

产生，其中，$e(n)$ 是一个激励白噪声序列。不失一般性，假定 $a(0) = 1$，并且 MA 阶数 q 小于或等于 AR 阶数 p，即 $q \leqslant p$。ARMA 模型的传递函数 $H(z)$ 定义为

$$H(z) = \sum_{i=0}^{\infty} h(i)z^{-i} = \frac{b(0) + b(1)z^{-1} + \cdots + b(q)z^{-q}}{a(0) + a(1)z^{-1} + \cdots + a(p)z^{-p}} \tag{2.9.10}$$

在定理 2.9.2 中作变量代换 $m = p$，并令

$$a_i = a(p-i), \qquad i = 0, 1, \cdots, p$$

$$b_i = \begin{cases} b(q-i), & i = 0, 1, \cdots, q \\ 0, & i = q+1, q= \ 2, 3, \cdots, p \end{cases}$$

显然，对 ARMA(p,q) 模型式 (2.9.9) 应用定理 2.9.2，立即有重要结论：由 ARMA 模型的冲激响应 $h(i)$ 构造的 Hankel 矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的秩等于 p，即

$$\text{rank}(\boldsymbol{H}) = \text{rank}\begin{bmatrix} h(0) & h(1) & h(2) & \cdots \\ h(1) & h(2) & h(3) & \cdots \\ h(2) & h(3) & h(3) & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \end{bmatrix} = p$$

利用一个 ARMA(p,q) 模型的 Hankel 矩阵的秩等于 p 这一结果，可以分析 ARMA 建模时 AR 参数的唯一可辨识性。这一可辨识性是 Gersch 分析的 [169]。对这一分析及其应用有兴趣的读者也可参考文献 [524, pp.87~89]。

2.10 Hadamard 矩阵

Hadamard 矩阵是在通信、信息论和信号处理中一种重要的特殊矩阵。

定义 2.10.1 $\boldsymbol{H}_n \in R^{n\times n}$ 称为 Hadamard 矩阵，若它的所有元素取 $+1$ 或者 -1，并且满足

$$\boldsymbol{H}_n\boldsymbol{H}_n^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{H}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_n = n\boldsymbol{I}_n \tag{2.10.1}$$

关于 Hadamard 矩阵的构造，有下面的注意事项。

(1) 观察知，用 -1 乘 Hadamard 矩阵的任意一行或者任意一列的元素，得到的结果仍然为一 Hadamard 矩阵。于是，可以得到第 1 列和第 1 行的所有元素为 $+1$ 的 Hadamard 矩阵，并称之为规范化 Hadamard 矩阵。

(2) 容易验证 $\frac{1}{\sqrt{n}}\boldsymbol{H}_n$ 为标准正交矩阵。

对 Hadamard 矩阵进行规范化，将大大方便大维数的 Hadamard 矩阵的构造。下面的定理给出了规范化的标准正交 Hadamard 矩阵的一种通用构造方法。

定理 2.10.1 令 $n = 2^k$，$k = 1, 2, \cdots$，则规范化的标准正交 Hadamard 矩阵具有通用构造公式：

$$\boldsymbol{H}_{2n} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} \boldsymbol{H}_n & \boldsymbol{H}_n \\ \boldsymbol{H}_n & -\boldsymbol{H}_n \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{H}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{2.10.2}$$

证明 用数学归纳法证明。显然，$\boldsymbol{H}_2$ 是规范化的正交 Hadamard 矩阵，因为容易验证 $\boldsymbol{H}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_2 = \boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_2^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}_2$。假设 $n = 2^k$ 时 $\boldsymbol{H}_{2^k}$ 是规范化的正交 Hadamard 矩阵，即有 $\boldsymbol{H}_{2^k}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_{2^k} = \boldsymbol{H}_{2^k}\boldsymbol{H}_{2^k}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}_{2^k\times 2^k}$。于是，对于 $n = 2^{k+1}$，容易看出

$$\boldsymbol{H}_{2^{k+1}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} \boldsymbol{H}_{2^k} & \boldsymbol{H}_{2^k} \\ \boldsymbol{H}_{2^k} & -\boldsymbol{H}_{2^k} \end{bmatrix}$$

满足正交条件，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{H}_{2^{k+1}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_{2^{k+1}} &= \frac{1}{2}\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}_{2^k}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{H}_{2^k}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{H}_{2^k}^{\mathrm{T}} & -\boldsymbol{H}_{2^k}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}_{2^k} & \boldsymbol{H}_{2^k}\\ \boldsymbol{H}_{2^k} & -\boldsymbol{H}_{2^k}\end{bmatrix}\\ &= \frac{1}{2}\begin{bmatrix}2\boldsymbol{I}_{2^k\times 2^k} & \boldsymbol{O}_{2^k\times 2^k}\\ \boldsymbol{O}_{2^k\times 2^k} & 2\boldsymbol{I}_{2^k\times 2^k}\end{bmatrix} = \boldsymbol{I}_{2^{k+1}\times 2^{k+1}}\end{aligned}$$

类似地，容易证明 $\boldsymbol{H}_{2^{k+1}}\boldsymbol{H}_{2^{k+1}}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}_{2^{k+1}\times 2^{k+1}}$。另外，由于 $\boldsymbol{H}_{2^k}$ 是规范化的，所以 $\boldsymbol{H}_{2^{k+1}}$ 也是规范化的。因此，定理对于 $n = 2^{k+1}$ 也成立。 ■

式 (2.10.2) 也可以利用矩阵的 Kronecker 积写成

$$\boldsymbol{H}_{2n} = \boldsymbol{H}_2 \otimes \boldsymbol{H}_n \tag{2.10.3}$$

例 2.10.1 当 $n = 2^3 = 8$ 时，Hadamard 矩阵

$$\boldsymbol{H}_8 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1\\ 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1 & 1 & -1\\ 1 & 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1\\ 1 & -1 & -1 & 1 & 1 & -1 & -1 & 1\\ 1 & 1 & 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1\\ 1 & -1 & 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1\\ 1 & 1 & -1 & -1 & -1 & -1 & 1 & 1\\ 1 & -1 & -1 & 1 & -1 & 1 & 1 & -1 \end{bmatrix}$$

容易看出，Hadamard 矩阵的每一行都是区间 (0,1) 上的分段线性函数。如果用 $\phi_0(t)$, $\phi_1(t),\cdots,\phi_7(t)$ 分别表示 Hadamard 矩阵第 1~8 行的波形函数，则如图 2.10.1 所示。

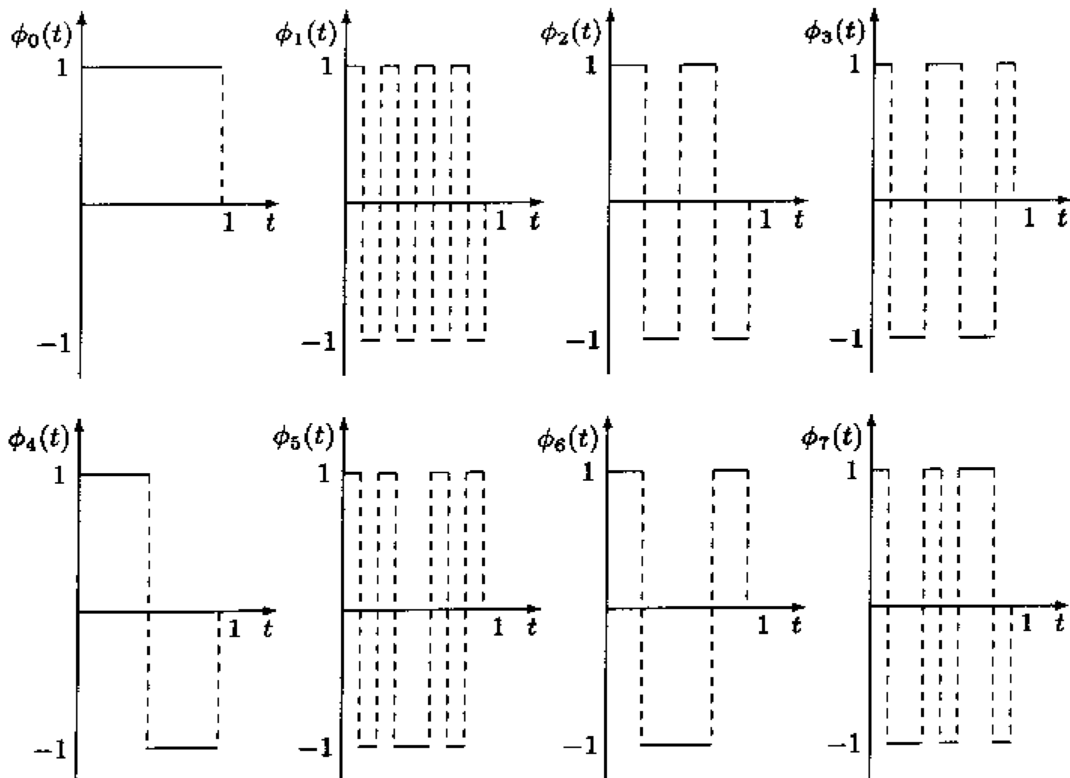


图 2.10.1 Hadamard 矩阵每行的波形

由图 2.10.1 容易看出，$\phi_0(t),\phi_1(t),\cdots,\phi_7(t)$ 这八个矩形脉冲函数相互正交，即

$$\int_0^1 \phi_i(t)\phi_j(t)\mathrm{d}t = \begin{cases} 1, & i=j \\ 0, & i\neq j \end{cases} \tag{2.10.4}$$

当 $\boldsymbol{H}$ 为 Hadamard 矩阵时，线性变换 $\boldsymbol{Y}=\boldsymbol{HX}$ 称为 Hadamard 变换。由于 Hadamard 矩阵是规范化的标准正交矩阵，并且元素只取 +1 或 −1，故 Hadamard 矩阵是唯一只使用加法和减法的标准正交变换。Hadamard 矩阵可以用作移动通信中的编码，得到的码称为 Hadamard 码 (或称 Walsh-Hadamard 码)。另外，由于 Hadamard 矩阵的行向量之间的正交性，行向量可以用来仿真码分多址中各个用户的扩频波形向量。

本章小结

本章介绍了两类具有特殊结构的矩阵：一类特殊矩阵与矩阵的运算有关，如互换矩阵、置换矩阵、选择矩阵、带型矩阵、相似矩阵以及相合矩阵等。另一类特殊矩阵与有关事物的抽象表示有关，如循环矩阵、Hermitian 矩阵、中心化矩阵、Vandermonde 矩阵、Fourier 矩阵、Hankel 矩阵和 Hadamard 矩阵等。

在讲述一些特殊矩阵时，本章还依次介绍了置换矩阵在盲信号分离中的应用；中心化矩阵和对角加矩阵在数理统计中的应用；Vandermonde 矩阵在谐波恢复中的应用；Fourier 矩阵在 Fourier 变换中的应用；Hankel 矩阵在系统辨识中的应用；Hadamard 矩阵在移动通信的编码和扩频信号仿真中的应用。

习 题

2.1 证明多个正交矩阵的乘积仍然为正交矩阵。

2.2 令 $\boldsymbol{A}$ 为实对称矩阵，$\boldsymbol{B}$ 为实反对称矩阵，且这两个矩阵是乘积可交换的，即 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}$。证明，若 $\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}$ 是非奇异的，则 $(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B})$ 是正交矩阵。

2.3 令 $\boldsymbol{E}_{\alpha(p)}\boldsymbol{A}$ 是使矩阵 $\boldsymbol{A}$ 第 p 行乘常数 α 的基本矩阵，且 $\boldsymbol{E}_{(p)+\alpha(q)}\boldsymbol{A}$ 第 q 行乘非零常数 α 后，加到 $\boldsymbol{A}$ 的第 p 行的基本矩阵。证明基本矩阵的下列性质：

(1) $\det\left(\boldsymbol{E}_{\alpha(p)}\right)=\alpha$。

(2) $\det\left(\boldsymbol{E}_{(p)+\alpha(q)}\right)=1$。

2.4 令 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 是下三角矩阵。

(1) 求 $\boldsymbol{A}$ 可对角化的条件。

(2) 若 $a_{11}=a_{22}=\cdots=a_{nn}$，且至少有一个元素 $a_{ij}\neq 0\ (i>j)$，证明：$\boldsymbol{A}$ 不可对角化。

2.5 令

$$T=\begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1n} \\ 0 & t_{22} & \cdots & t_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & t_{nn} \end{bmatrix}$$

为上三角矩阵。证明：

(1) 若对某个 $1 \leqslant i \leqslant n$ 有 $t_{ii}=0$，则 $\boldsymbol{T}$ 奇异。

(2) 若 $t_{ii} \neq 0,\ i=1,2,\cdots,n$，则 $\boldsymbol{T}$ 非奇异。

2.6 设矩阵

$$A=\begin{bmatrix} 3 & 2 & -2 \\ -c & -1 & c \\ 4 & 2 & -3 \end{bmatrix}$$

求 c 值，使得 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 为对角矩阵。并求出矩阵 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{B}$。

2.7 若 $\boldsymbol{A}$ 为幂等矩阵和对称矩阵，证明 $\boldsymbol{A}$ 是半正定的。

2.8 证明：若 $\boldsymbol{A}$ 为正定矩阵，并且 $F(z)=\sum_{n=0}^{\infty} c_n z^n$，$c_n \geqslant 0$，则 $F(\boldsymbol{A})$ 正定。

2.9 令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 正定，并且其元素 $a_{ij} \geqslant 0$。证明

$$\boldsymbol{A}(n)=\begin{bmatrix} a_{11}^n & a_{12}^n \\ a_{21}^n & a_{22}^n \end{bmatrix}, \quad n>0$$

正定。

2.10 证明：一个维数为奇数的斜对称矩阵，其行列式必等于零。

2.11 令 $\boldsymbol{x}=[1,3,5,7,9]^{\mathrm{T}}$，求矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$，使得

(1) $1^2+3^2+5^2+7^2+9^2=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$。

(2) $(1+3+5+7+9)^2/5=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$。

(3) $(1-5)^2+(3-5)^2+(5-5)^2+(7-5)^2+(9-5)^2=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{x}$。

2.12 设

$$\begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}=\boldsymbol{P}\begin{bmatrix} \xi \\ \eta \\ \zeta \end{bmatrix}$$

为一正交变换，它将二次曲面方程

$$x^2+ay^2+z^2+2bxy+2xz+2yz=4$$

化为椭圆柱面方程 $\eta^2+4\zeta^2=4$，求 a,b 的数值和正交矩阵 $\boldsymbol{P}$。

2.13 一个 n 阶 Helmert 矩阵 $\boldsymbol{H}_n$ 的第 1 行为 $n^{-1/2}\boldsymbol{1}_n^{\mathrm{T}}$，其他 $n-1$ 行具有分块形式 [411, p.71]

$$\frac{1}{\sqrt{\lambda_i}}\left[\boldsymbol{1}_i^{\mathrm{T}},-i,\boldsymbol{0}_{n-i-1}^{\mathrm{T}}\right], \quad \lambda_i=i(i+1),\ i=1,2,\cdots,n-1$$

式中，$\mathbf{1}_i^{\mathrm{T}}$ 和 $\mathbf{0}_i^{\mathrm{T}}$ 分别表示元素全部为 1 和 0 的 i 阶行向量。例如，

$$\boldsymbol{H}_4 = \begin{bmatrix} 1/\sqrt{4} & 1/\sqrt{4} & 1/\sqrt{4} & 1/\sqrt{4} \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 & 0 \\ 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{6} & -2/\sqrt{6} & 0 \\ 1/\sqrt{12} & 1/\sqrt{12} & 1/\sqrt{12} & -3\sqrt{12} \end{bmatrix}$$

将 n 阶 Helmert 矩阵分块为

$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{h}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{K} \end{bmatrix}$$

式中，$\boldsymbol{h} = n^{-1/2}\mathbf{1}^{-1/2}$，而 $\boldsymbol{K}$ 表示 $\boldsymbol{H}$ 的最后 $n-1$ 行。

(1) 证明 $\boldsymbol{H}\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}_n$。

(2) 对于 n 阶向量 $\boldsymbol{x}$，证明

$$n^{-1}\bar{x}_n^2 = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{h}\boldsymbol{x}$$

式中，$\bar{x}_n = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^n x_i$；并证明

$$S_n = \sum_{i=1}^n \left(x_i - \sum_{k=1}^n x_k/n \right)^2$$

可以表示为

$$S_n = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}$$

(3) 推导递推公式

$$S_n = S_{n-1} + (1-1/n)(\bar{x}_{n-1} - x_n)$$

式中，$\bar{x}_{n-1} = \frac{1}{n-1}\sum_{i=1}^{n-1} x_i$。

2.14 令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 为对称矩阵，并且满足

$$|\boldsymbol{I} - \lambda\boldsymbol{A}|\,|\boldsymbol{I} - \mu\boldsymbol{B}| = |\boldsymbol{I} - \lambda\boldsymbol{A} - \mu\boldsymbol{B}|, \quad \forall\lambda, \mu$$

证明 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{O}$ (零矩阵)。

2.15 证明：若 $\boldsymbol{A}$ 为实斜对称矩阵，则 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{I}$ 非奇异。

2.16 假定 $\boldsymbol{A}$ 是一实斜对称矩阵，证明 Cayley 变换 $\boldsymbol{T} = (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^{-1}$ 为正交矩阵。

2.17 令 $\boldsymbol{A}$ 是正交矩阵，且 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{I}$ 非奇异。证明：矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可表示为 Cayley 变换

$$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S})(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{S})^{-1}$$

式中，$\boldsymbol{S}$ 为实斜对称矩阵。

2.18 令 $\boldsymbol{P}$ 是一个 $n \times n$ 置换矩阵，证明存在一个正整数 k，使得 $\boldsymbol{P}^k = \boldsymbol{I}$。（提示：考虑矩阵序列 $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{P}^2, \boldsymbol{P}^3, \cdots$。）

2.19 假定 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 是两个 $n\times n$ 置换矩阵，证明 $\boldsymbol{PQ}$ 也是一个 $n\times n$ 置换矩阵。

2.20 证明：对于每一个矩阵 $\boldsymbol{A}$，都存在一个三角矩阵 $\boldsymbol{T}$，使得 $\boldsymbol{TA}$ 为酉矩阵。

2.21 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个给定的矩阵。证明：可以找到一个主对角线上的元素取 ±1 的矩阵 $\boldsymbol{J}$，使得 $\boldsymbol{JA}+\boldsymbol{I}$ 非奇异。

2.22 证明：若 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{A}+\mathrm{j}\boldsymbol{B}$ 为 Hermitian 矩阵，且 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则行列式

$$|\det(\boldsymbol{H})|^2=|\boldsymbol{A}|^2|\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{B}|$$

2.23 令 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{S}$ 为 $n\times n$ 矩阵，且 $\boldsymbol{S}$ 非奇异。

(1) 证明 $(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{AS})^2=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{S}$ 和 $(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{AS})^3=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}^3\boldsymbol{S}$。

(2) 利用数学归纳法证明 $(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{AS})^k=\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{S}$，其中，$k$ 为正整数。

2.24 证明：若 $\boldsymbol{A}$ 是可对角化的，并且 $\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 相似，则 $\boldsymbol{B}$ 是可对角化的。(提示：假定 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{AS}=\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{AW}=\boldsymbol{B}$。)

2.25 假定 $\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 相似，证明：

(1) $\boldsymbol{B}+\alpha\boldsymbol{I}$ 与 $\boldsymbol{A}+\alpha\boldsymbol{I}$ 相似。

(2) $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$ 与 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 相似。

(3) 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 非奇异，则 $\boldsymbol{B}^{-1}$ 与 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 相似。

2.26 假定 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 为 $n\times n$ 矩阵，并且 $\boldsymbol{B}$ 非奇异，证明 $\boldsymbol{AB}$ 与 $\boldsymbol{BA}$ 相似。

2.27 证明：若 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $n\times n$ 单位矩阵 $\boldsymbol{I}$ 相似，则 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$。

2.28 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 实矩阵，证明 $\boldsymbol{B}=(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})/2$ 为对称矩阵，而 $\boldsymbol{C}=(\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})/2$ 为斜对称矩阵。

2.29 给定 $n+1$ 个不同的数 $x_0,x_1,\cdots,x_n$ 和任意 $n+1$ 个数的集合 $\{y_0,y_1,\cdots,y_n\}$，则存在一个唯一的多项式 $p(x)=a_0+a_1x+a_2x^2+\cdots+a_nx^n$，使得 $p(x_0)=y_0,p(x_1)=y_1,\cdots,p(x_n)=y_n$。求 $a_0,a_1,\cdots,a_n$ 的表达式。

2.30 给定 $n+1$ 个不同的数 $\beta_0,\beta_1,\cdots,\beta_n$ 和任意 $n+1$ 个数的集合 $\{y_0,y_1,\cdots,y_n\}$，证明：存在唯一的一个多项式 $y(x)=a_0\mathrm{e}^{\beta_0x}+a_1\mathrm{e}^{\beta_1x}+\cdots+a_n\mathrm{e}^{\beta x}$ 满足约束条件 $y(0)=y_0,y'(0)=y_1,\cdots,y^{(n)}(0)=y_n$，其中，$y^{(k)}$ 表示 $\dfrac{\mathrm{d}y(x)}{\mathrm{d}x^k}$。

2.31 [240, p.101] 第 i 行和第 j 列元素为 $1/(i+j-1)$ 的 $n\times n$ 矩阵称为 Hilbert 矩阵。令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 6×6 维 Hilbert 矩阵，并且

$$\boldsymbol{b}=[1,2,1,1.414,1,2]^{\mathrm{T}},\qquad \boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}=[1,2,1,1.4142,1,2]^{\mathrm{T}}$$

试用 MATLAB 求解矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}_1=\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{Ax}_2=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}$，并比较 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$。为什么尽管向量 $\boldsymbol{A}$ 的扰动很小，$\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 却相差很大？

2.32 [36, p.68] 矩阵 $\boldsymbol{A}=[a_{ij}],i,j=1,2,3,4$ 称为 Lorentz 矩阵，若变换 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Ay}$ 使得二次型 $Q(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}=x_1-x_2^2-x_3^2-x_4^2$ 不变，即 $\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{y})$。证明两个 Lorentz 矩阵的乘积仍然为 Lorentz 矩阵。

2.33 [36, p.265] 一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{M}$ 称为 Markov 矩阵，若其元素满足条件 $m_{ij} \geqslant 0, \sum_{i=1}^{n} m_{ij} = 1, j = 1, 2, \cdots, n$。假定 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 均为 Markov 矩阵，证明：

(1) 对于常数 $0 \leqslant \lambda \leqslant 1$，矩阵 $\lambda \boldsymbol{P} + (1-\lambda)\boldsymbol{Q}$ 是 Markov 矩阵。

(2) 矩阵乘积 $\boldsymbol{PQ}$ 也为 Markov 矩阵。

2.34 [36, p.265] 一个 $n \times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 称为概率向量 (probability vector)，若其元素满足与概率公式类似的条件 $x_i \geqslant 0$ 和 $\sum_{i=1}^{n} x_i = 1$。证明：若 $\boldsymbol{x}$ 为概率向量，则矩阵 $\boldsymbol{M}$ 是 Markov 矩阵，当且仅当 $\boldsymbol{Mx}$ 是概率向量。

2.35 令 $y_i = y_i(x_1, x_2, \cdots, x_n), i = 1, 2, \cdots, n$ 是关于 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 的 n 个函数。矩阵 $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}) = [\partial y_i / \partial x_j]$ 称为函数 $y_i(x_1, x_2, \cdots, x_n), i = 1, 2, \cdots, n$ 的 Jacobian 矩阵，其行列式称为 Jacobian 行列式。式中，$\boldsymbol{y} = [y_1, y_2, \cdots, y_n]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^{\mathrm{T}}$。证明 $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{y})\boldsymbol{J}(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{J}(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{x})$。

2.36 令 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Y}$ 分别为对称矩阵，并且 $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{AXA}^{\mathrm{T}}$。证明：Jacobian 行列式 $|\boldsymbol{J}(\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{X})|$ 等于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行列式的 $n+1$ 次方，即 $|\boldsymbol{J}(\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{X})| = |\boldsymbol{A}|^{n+1}$。

2.37 证明：若 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵 (即满足 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$)，则 $\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}$ 为正规矩阵。

2.38 若 $\boldsymbol{B}$ 为正规矩阵，并且存在一个角度 θ，使得 $\boldsymbol{A}\mathrm{e}^{\mathrm{j}\theta} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\theta} \geqslant 0$，其中，$\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{B}$。证明 $\boldsymbol{A}$ 是正规矩阵。

2.39 满足条件 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 称为可交换矩阵 (commute matrix)。证明：若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 可交换，则 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 可交换的条件是 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵。

2.40 [36, p.226] 令 $\boldsymbol{A}$ 为复矩阵，证明 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵，当且仅当下列条件之一成立：

(1) $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} + \mathrm{j}\boldsymbol{C}$，其中，$\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 为 Hermitian 矩阵，并且可交换。

(2) $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{DU}$，其中，$\boldsymbol{U}$ 为酉矩阵，且 $\boldsymbol{D}$ 为对角矩阵。

(3) $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{UH}$，其中，$\boldsymbol{U}$ 为酉矩阵，$\boldsymbol{H}$ 为 Hermitian 矩阵，并且 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{H}$ 可交换。

2.41 令 $u_1, u_2, \cdots, u_n$ 是 n 阶线性微分方程

$$u^{(n)} + p_1(t)u^{(n-1)} + \cdots + p_n(t)u = 0$$

的线性无关解。矩阵

$$\boldsymbol{W} = \begin{bmatrix} u_1 & u_2 & \cdots & u_n \\ u_1' & u_2' & \cdots & u_n' \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_1^{(n-1)} & u_2^{(n-1)} & \cdots & u_n^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

称为 Wronskian 矩阵 [261]，其行列式 $W(u_1, u_2, \cdots, u_n) = \det(\boldsymbol{W})$ 称为 $u_1, u_2, \cdots, u_n$ 的 Wronskian 函数。证明：

$$W(t) = W(u_1, u_2, \cdots, u_n) = W(t_0) \exp\left(-\int_{t_0}^{t} p_1(s)\mathrm{d}s\right)$$

2.42 证明：若 $\boldsymbol{A}$ 是斜 Hermitian 矩阵，则 $\langle \boldsymbol{Ax}, \boldsymbol{x} \rangle = 0$ 对任意向量 $\boldsymbol{x} \in C^n$ 成立。

第 3 章　Toeplitz 矩阵

Toeplitz 矩阵是数学和工程中应用广泛的特殊矩阵之一。因此，有必要专题讨论这种矩阵的性质 (半正定性)。由于工程中许多典型问题都涉及 Toeplitz 线性方程组的求解，所以还有必要就 Toeplitz 线性方程组的求解进行详细介绍。利用 Toeplitz 矩阵具有的非常特殊的结构，可以推导递推求解及快速求解的一些方法。本章将对其中的几种典型算法予以重点阐述。最后一节将介绍 Toeplitz 矩阵的快速余弦变换。

3.1　半 正 定 性

在数学和工程 (例如信号处理与系统理论等) 问题中，常常需要求解具有特殊结构的线性方程组 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_0 & a_{-1} & a_{-2} & \cdots & a_{-n} \\ a_1 & a_0 & a_{-1} & \cdots & a_{-n+1} \\ a_2 & a_1 & a_0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & a_{-1} \\ a_n & a_{n-1} & \cdots & a_1 & a_0 \end{bmatrix} = [a_{i-j}]_{i,j=0}^{n} \tag{3.1.1}$$

这种形式取 $\boldsymbol{A} = [a_{i-j}]_{i,j=0}^{n}$ 的矩阵称为 Toeplitz 矩阵。因此，任何一条对角线取相同元素的矩阵是 Toeplitz 矩阵。之所以称为 Toeplitz 矩阵，乃是这种特殊矩阵是 Toeplitz 于 1900 年代初在研究与 Laurent 级数有关的双线性函数的一篇论文中提出来的 [445]。

最常见的 Toeplitz 矩阵为对称 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{A} = [a_{|i-j|}]_{i,j=0}^{n}$，即其元素还满足对称关系 $a_{-i} = a_i, i = 1, 2, \cdots, n$。可见，对称 Toeplitz 矩阵仅由其第 1 行元素就可以完全描述。因此，常将对称 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 简记作 $\boldsymbol{A} = \text{Toep}[a_0, a_1, \cdots, a_n]$。

若一个复 Toeplitz 矩阵的元素满足复共轭对称关系 $a_{-i} = a_i^*$，即

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_0 & a_1^* & a_2^* & \cdots & a_n^* \\ a_1 & a_0 & a_1^* & \cdots & a_{n-1}^* \\ a_2 & a_1 & a_0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & a_1^* \\ a_n & a_{n-1} & \cdots & a_1 & a_0 \end{bmatrix} \tag{3.1.2}$$

则称之为 Hermitian Toeplitz 矩阵。

特别地，具有特殊结构

$$
\boldsymbol{A}_S = \begin{bmatrix} 0 & -a_1^* & -a_2^* & \cdots & -a_n^* \\ a_1 & 0 & -a_1^* & \cdots & -a_{n-1}^* \\ a_2 & a_1 & 0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -a_1^* \\ a_n & a_{n-1} & \cdots & a_1 & 0 \end{bmatrix} \tag{3.1.3}
$$

的 $(n+1)\times(n+1)$ 维 Toeplitz 矩阵称为斜 Hermitian Toeplitz 矩阵；而

$$
\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a_0 & -a_1^* & -a_2^* & \cdots & -a_n^* \\ a_1 & a_0 & -a_1^* & \cdots & -a_{n-1}^* \\ a_2 & a_1 & a_0 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -a_1^* \\ a_n & a_{n-1} & \cdots & a_1 & a_0 \end{bmatrix} \tag{3.1.4}
$$

称为斜 Hermitian 型 Toeplitz 矩阵。式中，a_0 为实数。显然，一个斜 Hermitian 型 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以写作 $\boldsymbol{A} = a_0\boldsymbol{I} + \boldsymbol{A}_S$，其中，$\boldsymbol{A}_S$ 为斜 Hermitian Toeplitz 矩阵。斜 Hermitian Toeplitz 矩阵和斜 Hermitian 型 Toeplitz 矩阵在求解离散化的双曲差分方程时经常会遇到 [63],[212]。

Toeplitz 矩阵在数学和工程中有着广泛的应用。例如，在信号处理中，有赖于通过求解 Toeplitz 矩阵方程组获得的参数包括：递推数字滤波器的系数 [89],[207]、一维和二维平稳自回归 (AR) 模型的 AR 参数 [254, pp.368~379],[255] 等。又如，信号和图像的恢复也可归结为 Toeplitz 矩阵方程组的求解 [77]。其他的应用例子有：偏微分方程和卷积型积分方程的求解、Pade 逼近和控制理论中的最小实现问题等 (参见文献 [67] 及其中的参考文献)。

下面是信号处理和时间序列分析中对称 Toeplitz 矩阵的一个典型例子。

例 3.1.1 考虑一实的 AR 模型

$$
x(t) + \sum_{i=1}^{p} a_i x(t-i) = e(t) \tag{3.1.5}
$$

其中，$e(t)$ 为零均值、方差 σ^2 的高斯白噪声。用 $x(t-l)$ 同乘上式两边，然后取数学期望，则得到有名的 Yule-Walker 方程

$$
\sum_{i=0}^{p} a_i r_{l-i} = \sigma^2 \delta(l) \tag{3.1.6}
$$

若取 $l = 0, 1, \cdots, p$，则有

$$
\begin{bmatrix} r_0 & r_{-1} & \cdots & r_{-p} \\ r_1 & r_0 & \cdots & r_{-p+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ r_p & r_{p-1} & \cdots & r_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_p \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sigma^2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.1.7}
$$

显然，矩阵方程 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的实协方差矩阵 $\boldsymbol{R}=[r_{i-j}]_{i,j=0}^{p}$ 就是 Toeplitz 矩阵。由于实协方差函数为偶函数，即 $r_{-k}=r_k, k=1,2,\cdots$，故 $\boldsymbol{R}$ 是一对称 Toeplitz 矩阵。

考查式 (3.1.1) 的对称 Toeplitz 矩阵，令其主子式为

$$D_k=|\boldsymbol{A}_k|,\qquad k=0,1,\cdots,n \tag{3.1.8}$$

则 $\boldsymbol{A}_k$ 是正定的，当且仅当 $D_k>0,\ 0\leqslant k\leqslant n$。然而，值得指出的是，类似的结论对于对称 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 的半正定性却不一定成立。更具体地说，$D_k\geqslant 0,\ 0\leqslant k\leqslant n$ 这一事实对于 $\boldsymbol{A}_k$ 的半正定性并不是充分条件。请看一个反例 [297]：

$$\boldsymbol{A}_2=\begin{bmatrix}0 & 0 & a\\ 0 & 0 & 0\\ a & 0 & 0\end{bmatrix} \tag{3.1.9}$$

在这个例子中，$D_0=D_1=D_2=0$。但是，删去矩阵的第 2 行和第 2 列组成的主子式等于 $-a^2$，因此 $\boldsymbol{A}_2$ 不是半正定的。严格说来，当且仅当所有的主子式都大于或等于零时，对称 Toeplitz 矩阵才是半正定的。显然，这一条件的判断比较麻烦。下面的定理给出了对称 Toeplitz 矩阵半正定性的一种简单检验方法，它不需要计算任何主子式。

定理 3.1.1 [297] 令 $\boldsymbol{R}_p=r_{|i-j|}, i,j=0,\cdots,p$ 是一个对称 Toeplitz 矩阵。若 m 是满足 $\boldsymbol{R}_{m-1}$ 正定和 $D_m=0$ 条件的最小正整数，则矩阵 $\boldsymbol{R}_p, p\geqslant m$ 是半正定的，当且仅当系数 $\{r_i, i>m\}$ 服从递归方程

$$r_i=-\sum_{k=1}^{m}a_m(k)r_{i-k},\qquad i=m+1,m+2,\cdots,p \tag{3.1.10}$$

式中，$\{a_m(k)\}, 1\leqslant k\leqslant m$ 为 AR(m) 模型的系数。

证明 参见文献 [297]。

Toeplitz 矩阵具有以下性质 [369]。

(1) Toeplitz 矩阵的线性组合仍然为 Toeplitz 矩阵。

(2) 若 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的元素 $a_{ij}=a_{|i-j|}$，则 $\boldsymbol{A}$ 为对称 Toeplitz 矩阵。

(3) Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的转置 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 仍然为 Toeplitz 矩阵。

(4) Toeplitz 矩阵的元素相对于交叉对角线对称。

3.2 Toeplitz 线性方程组的 Levinson 递推求解

在统计信号处理和其他相关领域，经常需要求解线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中，系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对称 Toeplitz 矩阵。这类方程称为 Toeplitz 线性方程组。自然地，我们对求解 Toeplitz 线性方程组的快速算法感兴趣。快速算法本质上应该是递推的，而且与在单位圆上正交的多项式 (称为 Levinson 多项式或 Szegö 多项式 [243]) 的递推计算密切相关，算法的复杂度为 $O(n^2)$，其中，$n+1$ 为对称 Toeplitz 矩阵的维数。

递推算法的基础在于 Toeplitz 矩阵具有非常特殊的结构可加利用。Levinson 递推是求解 Toeplitz 线性方程组的一类有效算法。对于实的正定 Toeplitz 矩阵，其预测多项式 (Levinson 多项式) 的经典 Levinson 递推 [279] 在计算上存在很大的冗余，Delsarte 与 Genin 提出了一种分基 Levinson 算法 [120]。随后，他们又提出了分基 Schur 算法 [121]。后来，Krishna 和 Morgera [262] 将分基 Levinson 递推从实 Toeplitz 线性方程组推广到复 Toeplitz 线性方程组。

本节先讨论经典 Levinson 递推，然后介绍实数情况下的分基 Levinson 递推和分基 Schur 算法，最后聚焦复数情况下的分基 Levinson 算法。

3.2.1 经典 Levinson 递推

考虑前向 m 阶线性预测

$$\hat{x}(n) = -\sum_{i=1}^{m} a_i^{(m)} x(n-i) \tag{3.2.1}$$

和后向 m 阶线性预测

$$\hat{x}(n-m) = -\sum_{i=1}^{m} a_i^{*(m)} x(n-m+i) \tag{3.2.2}$$

这里，$a_i^{(m)}$ 代表 m 阶预测器的第 i 个系数，$*$ 表示复数共轭。

定义前向预测误差

$$f(n) = x(n) - \hat{x}(n)$$

根据正交性原理知 $\mathrm{E}\{f(n)x^*(n-k)\} = 0, 1 \leqslant k \leqslant m$，代入式 (3.2.1) 后，即可得到预测方程 (即有名的 Yule-Walker 方程)：

$$\begin{bmatrix} R(0) & R(-1) & \cdots & R(-m) \\ R(1) & R(0) & \cdots & R(-m+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R(m) & R(m-1) & \cdots & R(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ a_1^{(m)} \\ \vdots \\ a_m^{(m)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_m \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.2.3}$$

式中，$R(i) = \mathrm{E}\{x(n)x^*(n-i)\}$ 是 $x(n)$ 的自协方差函数，而 $E_m = \sum_{i=0}^{m} a_m(i)R(-i)$ 是 m 阶预测误差滤波器的误差输出功率。简写式 (3.2.3)，前向预测误差滤波器的 Yule-Walker 方程为

$$\sum_{i=0}^{m} a_i^{(m)} R(k-i) = \begin{cases} E_m, & k = 0 \\ 0, & k = 1, 2, \cdots, m \end{cases} \tag{3.2.4}$$

在上式中取复数共轭，并注意到 $R^*(k-i) = R(i-k)$，可得后向预测误差滤波器的 Yule-Walker 方程为

$$\sum_{i=0}^{m} a_{m-i}^{*(m)} R(k-i) = \begin{cases} 0, & k = 0, 1, \cdots, m-1 \\ E_m, & k = m \end{cases} \tag{3.2.5}$$

类似地，对于 $m-1$ 阶前、后向预测误差滤波器，它们的 Yule-Walker 方程分别为

$$\sum_{i=0}^{m-1} a_i^{(m-1)} R(k-i) = \begin{cases} E_{m-1}, & k=0 \\ 0, & k=1,2,\cdots,m-1 \end{cases} \tag{3.2.6}$$

$$\sum_{i=0}^{m-1} a_{m-1-i}^{*(m-1)} R(k-i) = \begin{cases} 0, & k=0,1,\cdots,m-2 \\ E_{m-1}, & k=m-1 \end{cases} \tag{3.2.7}$$

令

$$\sum_{i=0}^{m-1} a_i^{(m-1)} R(m-i) = -\beta_m E_{m-1} \tag{3.2.8}$$

式中，β_m 是待确定的系数，称为反射系数或偏相关 (partial correlation) 系数。上式的共轭形式为

$$\sum_{i=0}^{m-1} a_i^{*(m-1)} R(i-m) = -\beta_m^* E_{m-1} \tag{3.2.9}$$

于是，综合式 (3.2.3) ~ 式 (3.2.9)，则有

$$\begin{bmatrix} R(0) & R(-1) & \cdots & R(-m) \\ R(1) & R(0) & \cdots & R(-m+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R(m-1) & R(m-2) & \cdots & R(-1) \\ R(m) & R(m-1) & \cdots & R(0) \end{bmatrix} \left(\begin{bmatrix} 1 \\ a_1^{(m-1)} \\ \vdots \\ a_{m-1}^{(m-1)} \\ 0 \end{bmatrix} + \beta_m \begin{bmatrix} 0 \\ a_{m-1}^{*(m-1)} \\ \vdots \\ a_1^{*(m-1)} \\ 1 \end{bmatrix} \right)$$

$$= \begin{bmatrix} E_{m-1} \\ 0 \\ \vdots \\ -\beta_m E_{m-1} \end{bmatrix} + \beta_m \begin{bmatrix} -\beta_m^* E_{m-1} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ E_{m-1} \end{bmatrix} \tag{3.2.10}$$

比较式 (3.2.3) 与式 (3.2.10)，显然有

$$a_i^{(m)} = a_i^{(m-1)} + \beta_m a_{m-i}^{*(m-1)}, \qquad i=0,1,\cdots,m-1 \tag{3.2.11}$$

$$\beta_m = a_m^{(m)} \tag{3.2.12}$$

$$E_m = (1-|\beta_m|^2) E_{m-1} \tag{3.2.13}$$

这就是求解 Toeplitz 线性方程组 (3.2.3) 的经典 Levinson 递推 (也叫 Levinson-Durbin 递推)。注意，由于预测误差能量 E_k 恒大于零，所以式 (3.2.13) 给出了反射系数的主要性质：它是有界的，即 $|\beta_m| < 1$。

3.2.2 Levinson 算法

上一小节推导了复数情况下的 Levinson 递推。现在考虑实数情况，即 $x(n)$ 和滤波器系数 $a_i^{(m)}$ 都是实数时的 Levinson 递推。此时，Levinson 递推的乘法运算可以减少一半。这样一种算法称为分基 Levinson 递推，下面用两种不同的方法推导之。

1. 矩阵方法[435]

在 $x(n)$ 为实数的情况下，其自协方差函数 $R(-i)=R(i)$，因此，Yule-Walker 方程式 (3.2.4) 和式 (3.2.5) 可以分别写作

$$\boldsymbol{T}^{(m)}\begin{bmatrix}1\\ \boldsymbol{a}^{(m)}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}E_m\\ 0\\ \vdots\\ 0\end{bmatrix} \tag{3.2.14}$$

$$\boldsymbol{T}^{(m)}\begin{bmatrix}\check{\boldsymbol{a}}^{(m)}\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\ \vdots\\ 0\\ E_m\end{bmatrix} \tag{3.2.15}$$

式中

$$\boldsymbol{T}^{(m)}=\begin{bmatrix}R(0) & R(1) & \cdots & R(m)\\ R(1) & R(0) & \cdots & R(m-1)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ R(m) & R(m-1) & \cdots & R(0)\end{bmatrix}$$

为对称 Toeplitz 矩阵，且

$$\boldsymbol{a}^{(m)}=[a_1^{(m)},a_2^{(m)},\cdots,a_m^{(m)}]^{\mathrm{T}}$$
$$\check{\boldsymbol{a}}^{(m)}=[a_m^{(m)},a_{m-1}^{(m)},\cdots,a_1^{(m)}]^{\mathrm{T}}$$

为方便计，令 $\boldsymbol{T}^{(m)}$ 第 1 行元素为 $[c_0,c_1,\cdots,c_m]$，即 $c_i=R(i)$。

令 $\boldsymbol{J}$ 为互换矩阵。由 $\boldsymbol{JTJ}=\boldsymbol{T}$(对称 Toeplitz 矩阵的交换不变性) 及 $\boldsymbol{JJ}=\boldsymbol{I}$ (互换矩阵的对合性质) 容易证明，两个线性方程式 (3.2.14) 和式 (3.2.15) 只是同一问题的等价表达。它们相加得到

$$\boldsymbol{T}^{(m)}\left(\begin{bmatrix}1\\ a^{(m)}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\check{a}^{(m)}\\ 1\end{bmatrix}\right)=[E_m,0,\cdots,0,E_m]^{\mathrm{T}} \tag{3.2.16}$$

或简写为

$$\boldsymbol{T}^{(m)}\boldsymbol{p}^{(m)}=[\tau_m,0,\cdots,0,\tau_m]^{\mathrm{T}} \tag{3.2.17}$$

式中，标量 τ_m 称为分基残差能量；$\boldsymbol{p}^{(m)}\in R^{m+1}$ 称为分基横向预测参数向量，定义为

$$\boldsymbol{p}^{(m)}=[p_0^{(m)},p_1^{(m)},\cdots,p_m^{(m)}]^{\mathrm{T}}$$

由于

$$\boldsymbol{p}^{(m)}=\begin{bmatrix}1\\ \boldsymbol{a}^{(m)}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\check{\boldsymbol{a}}^{(m)}\\ 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1+a_m^{(m)}\\ a_1^{(m)}+a_{m-1}^{(m)}\\ \vdots\\ a_{m-1}^{(m)}+a_1^{(m)}\\ a_m^{(m)}+1\end{bmatrix} \tag{3.2.18}$$

向量 $\boldsymbol{p}^{(m)}$ 的第 i 个元素为

$$p_i^{(m)} = a_i^{(m)} + a_{m-i}^{(m)}, \qquad i = 0, 1, \cdots, m \tag{3.2.19}$$

显然，$p_i^{(m)}$ 具有对称性 $p_i^{(m)} = p_{m-i}^{(m)}$，即向量 $\boldsymbol{p}^{(m)}$ 是对称的向量。

由此可以看出，Yule-Walker 方程式 (3.2.14) 中的参数向量 $\boldsymbol{a}^{(m)}$ 是非对称向量，而式 (3.2.17) 中的参数向量 $\boldsymbol{p}^{(m)}$ 则是对称的向量。这一对称性意味着只需要估计向量 $\boldsymbol{p}^{(m)}$ 中的 $m/2$ 个参数 $p_i^{(m)}, i = 1, 2, \cdots, m/2$。这就是分基的涵义。

由式 (3.2.17) 的第 1 行得到

$$\tau_m = [c_0, c_1, \cdots, c_m]\boldsymbol{p}^{(m)} \tag{3.2.20}$$

利用 $\boldsymbol{p}^{(m)}$ 的对称性，式 (3.2.20) 的计算可减少一半的乘法运算：

$$\tau_m = \sum_{i=0}^{(m-1)/2} (c_i + c_{m-i})p_i^{(m)}, \qquad m = \text{奇数} \tag{3.2.21}$$

$$\tau_m = c_{m/2}p_{m/2}^{(m)} + \sum_{i=0}^{(m-2)/2} (c_i + c_{m-i})p_i^{(m)}, \qquad m = \text{偶数} \tag{3.2.22}$$

上述二式实际上是分基协方差的内积。

下面推导分基横向预测参数向量 $\boldsymbol{p}^{(m)}$ 的递推公式。很明显，这种递推必须能够保持更新后的 $\boldsymbol{p}^{(m)}$ 仍然具有对称性。因此，自然会想到下面的递推形式：

$$\boldsymbol{p}^{(m+1)} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}^{(m)} \\ 0 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{p}^{(m)} \end{bmatrix} - \alpha_m \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{p}^{(m-1)} \\ 0 \end{bmatrix} \tag{3.2.23}$$

这就是所谓的分基 Levinson 递推。将分基 Levinson 递推公式 (3.2.23) 与经典 Levinson 递推 (3.2.11) 作一比较，不难看出二者的明显差别：由于 $\boldsymbol{p}^{(m+1)}$ 的对称性，分基递推的乘法运算是经典递推的一半。此外，分基 Levinson 递推中的系数 α_m 起着与 Levinson 递推中的反射系数 (或偏相关系数) β_m 相同的作用，故将 α_m 称为分基反射系数 (或分基偏相关系数) 是合适的。

分基 Levinson 算法的最后一个需要解决的问题是分基反射系数 α_m 的计算。为此，对式 (3.2.23) 左乘对称 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{T}^{(m+1)}$。令 $\mathbf{c}_m = [c_{m+1}, c_m, \cdots, c_1]^{\mathrm{T}}$，则

$$\boldsymbol{T}^{(m+1)} \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}^{(m)} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{T}^{(m)} & \mathbf{c}_m \\ \mathbf{c}_m^{\mathrm{T}} & c_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{p}^{(m)} \\ \mathbf{0} \end{bmatrix} = [\tau_m, 0, \cdots, 0, \tau_m, \gamma_m]^{\mathrm{T}} \tag{3.2.24}$$

其中，使用了式 (3.2.17)，且

$$\gamma_m = \boldsymbol{c}_m^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}^{(m)} \tag{3.2.25}$$

类似地，有

$$\boldsymbol{T}^{(m+1)} \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{p}^{(m)} \end{bmatrix} = [\gamma_m, \tau_m, 0, \cdots, 0, \tau_m]^{\mathrm{T}} \tag{3.2.26}$$

$$\boldsymbol{T}^{(m+1)} \begin{bmatrix} 0 \\ \boldsymbol{p}^{(m-1)} \\ 0 \end{bmatrix} = [\gamma_{m-1}, \tau_{m-1}, 0, \cdots, 0, \tau_{m-1}, \gamma_{m-1}]^{\mathrm{T}} \tag{3.2.27}$$

于是，用 $\boldsymbol{T}^{(m+1)}$ 左乘式 (3.2.23) 可得到

$$\begin{bmatrix}\tau_{m+1}\\0\\\vdots\\0\\\tau_{m+1}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\tau_m\\0\\\vdots\\0\\\tau_m\\\gamma_m\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\gamma_m\\\tau_m\\0\\\vdots\\0\\\tau_m\end{bmatrix}-\alpha_m\begin{bmatrix}\gamma_{m-1}\\\tau_{m-1}\\0\\\vdots\\0\\\tau_{m-1}\\\gamma_{m-1}\end{bmatrix} \tag{3.2.28}$$

由于我们只对 α_m 感兴趣，故由式 (3.2.28) 的第 2 行立即有

$$\alpha_m=\tau_m/\tau_{m-1} \tag{3.2.29}$$

综上所述，分基 Levinson 算法主要由分基 Levinson 递推公式 (3.2.23)，分基协方差的内积公式 (3.2.21) 和公式 (3.2.22)，以及分基反射系数计算公式 (3.2.29) 三部分组成。

2. 多项式方法

前面用矩阵的方法推导了分基 Levinson 递推公式。现在介绍推导递推公式的另外一种主要方法——多项式方法。

考查任意 $(m+1)$ 维列向量 $\boldsymbol{x}^{(m)}=[x_0^{(m)},x_1^{(m)},\cdots,x_m^{(m)}]^{\mathrm{T}}$。有趣的是，向量 $\boldsymbol{x}^{(m)}$ 可以表示为一个 m 阶多项式 $x_m(z)=\sum\limits_{i=0}^{m}x_i^{(m)}z^i$，反之亦然。对于一个给定的多项式 $x_m(z)=\sum\limits_{i=0}^{m}x_i^{(m)}z^i$，令 $\breve{x}_m(z)$ 表示 $x_m(z)$ 的互反多项式，即

$$\breve{x}_m(z)=z^m x_m(z^{-1})=\sum_{i=0}^{m}\breve{x}_i^{(m)}z^i=\sum_{i=0}^{m}x_{m-i}^{(m)}z^i \tag{3.2.30}$$

利用互换矩阵 $\boldsymbol{J}$ 和向量符号，可得多项式 $x_m(z)$ 的系数向量 $\boldsymbol{x}^{(m)}$ 与它的互反多项式 $\breve{x}_m(z)$ 的系数向量 $\breve{\boldsymbol{x}}^{(m)}=[\breve{x}_0^{(m)},\breve{x}_1^{(m)},\cdots,\breve{x}_m^{(m)}]^{\mathrm{T}}$ 之间的关系 $\breve{\boldsymbol{x}}^{(m)}=\boldsymbol{J}\boldsymbol{x}_m$。

若 $\boldsymbol{x}^{(m)}=\breve{\boldsymbol{x}}^{(m)}$，则称向量 $\boldsymbol{x}^{(m)}$ 为对称向量；若 $\boldsymbol{x}^{(m)}=-\breve{\boldsymbol{x}}^{(m)}$，便称向量 $\boldsymbol{x}^{(m)}$ 为反对称向量。类似地，若 $x_m(z)=\breve{x}_m(z)$，就称多项式 $x_m(z)$ 为对称多项式；若 $x_m(z)=-\breve{x}_m(z)$，则称多项式 $x_m(z)$ 为反对称多项式。

利用以上符号，多项式 $a_k(z)$ 的系数向量 $\boldsymbol{a}^{(k)}=[a_0^{(k)},a_1^{(k)},\cdots,a_k^{(k)}]^{\mathrm{T}}$ 是对称 Toeplitz 线性方程组

$$\boldsymbol{T}^{(k)}\boldsymbol{a}^{(k)}=[E_k,0,\cdots,0]^{\mathrm{T}} \tag{3.2.31}$$

的解。

Levinson 递推公式 (3.2.11) 也可以用多项式形式写作

$$a_k(z)=a_{k-1}(z)+\beta_k z\breve{a}_{k-1}(z) \tag{3.2.32}$$

反射系数 β_k 在数学文献中常称为 Schur-Szegö 参数。式 (3.2.32) 在有关信号处理的文献中被称为预测多项式，在有关数学的文献中则称为 Levinson-Szegö公式。

现在考虑新的预测多项式集合

$$p_k(z) = a_{k-1}(z) + z\tilde{a}_{k-1}(z), \quad k = 1, 2, \cdots, n+1 \tag{3.2.33}$$

注意，上式是式 (3.2.19) 对应的多项式表示。根据上述构造知，$p_k(z)$ 是对称多项式，因为它满足 $p_k(z) = z^k p_k(z^{-1})$。另外，式 (3.2.32) 与式 (3.2.33) 的比较表明，$p_k(z)$ 可以解释为在式 (3.2.32) 中强令 $\beta_k = 1$ 得到的。由于反射系数具有 $|\beta_k| < 1$ 的性质，所以很自然地，可以把 $\beta_k = 1$ 视为一种奇异情况。鉴于此，以后将多项式 $p_k(z)$ 称作奇异预测多项式。

利用式 (3.2.32) 与式 (3.2.33) 易得关系式

$$\lambda_k p_k(z) = a_k(z) + \tilde{a}_k(z), \quad \lambda_k = 1 + \beta_k \tag{3.2.34}$$

令 $\boldsymbol{p}^{(k)} = [p_0^{(k)}, p_1^{(k)}, \cdots, p_k^{(k)}]^{\mathrm{T}}$ 表示奇异预测多项式 $p_k(z) = \sum_{i=0}^{k} p_i^{(k)} z^i$ 的系数向量。由式 (3.2.31)，式 (3.2.33) 与式 (3.2.34) 可得结论：向量 $\boldsymbol{p}^{(k)}$ 是对称 Toeplitz 方程组

$$\boldsymbol{T}^{(k)}\boldsymbol{p}^{(k)} = [\tau_k, 0, \cdots, 0, \tau_k]^{\mathrm{T}}, \qquad \tau_k = E_k/\lambda_k \tag{3.2.35}$$

的解。式 (3.2.35) 直接给出结果

$$\tau_k = \sum_{i=0}^{k} c_i p_i^{(k)} \tag{3.2.36}$$

由于我们求解原 Toeplitz 线性方程组的目的是要得到预测滤波器参数 $a^{(k)}$ 和反射系数 β_k，所以如果它们不能由分基预测参数 $p^{(k)}$ 和分基反射系数 α_k 恢复的话，那么分基 Levinson 递推便失去意义。幸运的是，式 (3.2.33) 表明，预测多项式 $a_k(z)$ 有可能从多项式 $p_{k+1}(z)$ 得到。令我们更加惊异的是，$a_k(z)$ 还可以利用两个相邻的奇异预测多项式的线性组合确定。为了看出这一点，在式 (3.2.33) 中用 $k+1$ 代替 k，然后借助式 (3.2.34) 消去 $\tilde{a}_k(z)$。于是，得到

$$(1-z)a_k(z) = p_{k+1}(z) - \lambda_k z p_k(z) \tag{3.2.37}$$

上式直接给出下面的恢复公式：

$$a_i^{(k)} = a_{i-1}^{(k)} + p_i^{(k+1)} - \lambda_k p_{i-1}^{(k)}, \quad i = 1, 2, \cdots, k \tag{3.2.38}$$

这一公式提供了分基 Levinson 算法与经典 Levinson 算法之间的联系。

下面推导奇异预测多项式三项之间的递推关系。为此，先借助式 (3.2.37)，用 $p_k(z)$ 和 $p_{k+1}(z)$ 表示 $a_k(z)$。类似地，也用 $p_{k-1}(z)$ 和 $p_k(z)$ 表示 $a_{k-1}(z)$。然后，将这些结果代入 Levinson-Szegö 公式 (3.2.32)，立即有

$$p_{k+1}(z) - (1+z)p_k(z) + \alpha_k z p_{k-1}(z) = 0, \qquad \alpha_k = \lambda_{k-1}(2 - \lambda_k) \tag{3.2.39}$$

观察 λ_k 的定义式 (3.2.34) 和 τ_k 的定义式 (3.2.35)，由式 (3.2.13) 知，式 (3.2.39) 中的分基反射系数 α_k 可以写作

$$\alpha_k = \tau_k/\tau_{k-1}, \qquad k \geqslant 2 \tag{3.2.40}$$

注意，由于 τ_k 可以利用式 (3.2.36) 从 $p_k(z)$ 求出，故我们可以得出结论：多项式 $p_k(z), k = 1,2,\cdots,m+1$ 可以迭代使用式 (3.2.40) 和式 (3.2.39) 连续求出。递推公式 (3.2.39) 和公式 (3.2.40) 的合适初始值由下式给出：

$$p_0(z) = 2\,, \qquad p_1(z) = 1 + z\,, \qquad \tau_0 = c_0 \tag{3.2.41}$$

综合式 (3.2.36)，式 (3.2.39)~ 式 (3.2.41) 可以得到下面的完整分基 Levinson 算法。

算法 3.2.1 (分基 Levinson 算法)[120]

输入　协方差函数 $c_0, c_1, \cdots, c_n$

步骤 1　初始化

$$p^{(0)} = [2], \quad p^{(1)} = [1,1]^{\mathrm{T}}, \quad \tau_0 = c_0, \quad k = 2$$

步骤 2　计算

$$\tau_k = \sum_{i=0}^{(k-1)/2} (c_i + c_{k-i}) p_i^{(k)}, \quad k = \text{奇数}$$

$$\tau_k = c_{k/2} p_{k/2}^{(k)} + \sum_{i=0}^{(k-2)/2} (c_i + c_{k-i}) p_i^{(k)}, \quad k = \text{偶数}$$

步骤 3　利用式 (3.2.40) 计算 α_k。

步骤 4　利用式 (3.2.39) 中的第一式计算 $p_i^{(k+1)}$：

$$p_i^{(k+1)} = p_i^{(k)} + p_{i-1}^{(k)} - \alpha_k p_{i-1}^{(k-1)}$$

其中，$i = 1,2,\cdots,(k-1)/2(k = \text{奇数})$ 或 $(k-2)/2(k = \text{偶数})$。

步骤 5　利用式 (3.2.39) 的第二式计算 λ_k：

$$\lambda_k = 2 - \alpha_k / \lambda_{k-1}$$

步骤 6　利用式 (3.2.38) 计算预测参数 $a_i^{(k)}$。

步骤 7　$k \leftarrow k+1$，并重复步骤 2 ~ 步骤 6，进行高一阶递推，直至 $k = n$。

我们看到，矩阵方法和多项式方法得到的递推公式是完全相同的。在后面，将使用多项式推导复数情况下的 Levinson 递推。

算法 3.2.1 是一种对称形式的分基 Levinson 递推。现在，取式 (3.2.33) 的对偶形式

$$\tilde{p}_k(z) = a_{k-1}(z) - z\check{a}_{k-1}(z)\,, \qquad k = 1,2,\cdots,n+1 \tag{3.2.42}$$

易知 $\tilde{p}_k(z)$ 是反对称的，即满足 $\tilde{p}_k(z) = -z^k \tilde{p}_k(z^{-1})$。利用反对称多项式 $\tilde{p}_k(z)$，与对称形式的分基 Levinson 算法的推导完全类似，可以导出算法 3.2.1 的对偶形式——反对称形式的分基 Levinson 算法。对此感兴趣的读者可自行推导，或参考文献 [120]。

3.2.3 分基 Schur 算法

观察分基 Levinson 算法与经典 Levinson 算法的关系式 (3.2.38)，不难想到，在递推预测参数 $a_i^{(k)}$ 时，有可能只使用分基反射系数 α_k，而避免使用分基横向预测参数 $p_i^{(k)}$。这是因为 $p_i^{(k)}$ 与 α_k 之间存在关系式 (3.2.19)。分基 Schur 算法就是这样一种算法，其关键是引入"广义分基协方差"，定义为

$$\tau_j^{(k)} = \sum_{i=0}^{k} c_{i-j} p_i^{(k)} \tag{3.2.43}$$

注意，分基 Levinson 递推式 (3.2.23) 可以用紧凑的形式写作

$$p_i^{(k)} = p_i^{(k-1)} + p_{k-i}^{(k-1)} - \alpha_k p_{i-1}^{(k-2)} \tag{3.2.44}$$

将式 (3.2.44) 代入到广义分基协方差式 (3.2.43)，即得到广义分基协方差的递推公式为

$$\tau_j^{(k)} = \tau_j^{(k-1)} + \tau_{j-1}^{(k-1)} - \alpha_k \tau_{j-1}^{(k-2)} \tag{3.2.45}$$

容易验证，分基反射系数也可以利用广义分基协方差表示为

$$\alpha_{k+1} = \frac{\tau_k^{(k)}}{\tau_{k-1}^{(k-1)}} \tag{3.2.46}$$

于是，即得到下面的算法 [121]。

算法 3.2.2 (分基 Schur 算法)

输入　协方差函数 $c_0, c_1, \cdots, c_n$

步骤 1　初始化

$$\begin{aligned} &\alpha_2 = c_0 + c_1, \quad \beta_1 = a_1^{(1)} - c_1/c_0, \quad k = 2 \\ &\tau_i^{(0)} = 2c_i, \quad \tau_i^{(1)} = c_i + c_{i-1}, \quad i = 0, 1, \cdots, n+1 \end{aligned}$$

步骤 2　利用式 (3.2.45) 计算 $\tau_i^{(k)}, i = n, n-1, \cdots, k$。

步骤 3　利用式 (3.2.46) 计算分基反射系数 α_{k+1}。

步骤 4　计算

$$\beta_k = a_k^{(k)} = 1 - \frac{\alpha_{k+1}}{1 + \beta_{k-1}}$$

步骤 5　恢复预测参数

$$a_i^{(k)} = a_i^{(k-1)} + \beta_k a_{k-1-i}^{(k-1)}, \qquad i = 1, 2, \cdots, k-1$$

步骤 6　$k \leftarrow k+1$，并重复步骤 2 ~ 步骤 5，直至 $k = n$。

3.2.4 Hermitian Levinson 递推

现在，让我们来考虑复数情况下的分基 Levinson 递推。

令 $\boldsymbol{T}$ 是一个 $(n+1)\times(n+1)$ 复共轭对称的 Toeplitz 矩阵，称为 Hermitian Toeplitz 矩阵。假定矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的第 1 列元素为 $c_i\in C, i=0,1,\cdots,n$。由于 $\boldsymbol{T}$ 是 Hermitian 矩阵，所以 $c_{-i}=c_i^*, i=0,1,\cdots,n$。令 $\boldsymbol{T}_k$ 表示矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的 $(k+1)\times(k+1)$ 子矩阵，其中，$\boldsymbol{T}_n=\boldsymbol{T}$。

令 $\boldsymbol{x}_k=[x_0^{(k)},x_1^{(k)},\cdots,x_k^{(k)}]^{\mathrm{T}}$ 为一复列向量，$x_k(z)=\sum\limits_{i=0}^{k}x_i^{(k)}z^i$ 表示一个 k 阶复多项式。与实数情况类似，令 $\tilde{x}_k(z)$ 表示 $x_k(z)$ 的互反多项式，即

$$\tilde{x}_k(z)=z^kx_k^*(z^{-1})=\sum_{i=0}^{k}x_{k-i}^{*(k)}z^i \tag{3.2.47}$$

利用互换矩阵 $\boldsymbol{J}$ 和向量符号，则有 $\tilde{\boldsymbol{x}}_k=\boldsymbol{J}\boldsymbol{x}_k^*$。

向量 $\boldsymbol{x}_k$ 称为 Hermitian 向量，若 $\boldsymbol{x}_k=\tilde{\boldsymbol{x}}_k$。类似地，多项式 $x_k(z)$ 称为 Hermitian 多项式，若 $x_k(z)=\tilde{x}_k(z)$。

向量 $\boldsymbol{x}_k$ 称为反 Hermitian 向量，若 $\boldsymbol{x}_k=-\tilde{\boldsymbol{x}}_k$。类似地，多项式 $x_k(z)$ 称为反 Hermitian 多项式，若 $x_k(z)=-\tilde{x}_k(z)$。

Hermitian Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{T}$ 属于一个矩阵大类，它们统称为 Hermitian– 中心 Hermitian 矩阵。

Hermitian – 中心 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{T}$ 具有以下性质：

(1) $\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{T}$，即复共轭对称性 (Hermitian 性)。

(2) $\boldsymbol{JTJ}=\boldsymbol{T}^*$，即中心复共轭对称性 (中心 Hermitian 性)[1]。

这就是为什么称 $\boldsymbol{T}$ 为 Hermitian – 中心 Hermitian 矩阵的缘故。

类似地，一个实对称 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{T}$ 属于对称 – 中心对称矩阵类。对称 – 中心对称矩阵具有性质：

(1) $\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{T}$，即对称性。

(2) $\boldsymbol{JTJ}=\boldsymbol{T}$，即中心对称性。

对于 Hermitian Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{T}$，令 D_k 是子矩阵 $\boldsymbol{T}_k$ 的行列式。根据前面的分析，Levinson 多项式满足下面的“一步递推关系”：

$$a_k(z)=a_{k-1}(z)+z\beta_k\tilde{a}_{k-1}(z),\qquad k=1,2,\cdots,n \tag{3.2.48}$$

其中

$$\beta_k=-(D_{k-1}/D_{k-2})^{-1}\left(\sum_{i=0}^{k-1}c_{k-i}a_i^{(k-1)}\right) \tag{3.2.49}$$

$$(D_k/D_{k-1})=(D_{k-1}/D_{k-2})(1-|\beta_k|^2) \tag{3.2.50}$$

1 由于互换矩阵的作用，$\boldsymbol{JTJ}$ 是以行中心和列中心对换矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的所有行和列，即相当于以矩阵的中心为交换中心，对称交换 $\boldsymbol{T}$ 的所有元素。因此，$\boldsymbol{JTJ}$ 可以视为矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的中心对称矩阵。

且 $D_{-1}=1, a_0(z)=1$。

为了减少 Levinson 递推的计算量，有必要利用 Hermitian Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{T}$ 固有的结构。令 P_n 表示 z 的 $k \leqslant n$ 阶复多项式空间。用 Levinson 多项式定义 Hermitian 多项式 $s_k(z) \in P_n$ 和反 Hermitian 多项式 $\tilde{s}_k(z) \in P_n$，即

$$s_k(z)=\frac{1}{2}[a_k(z)+\check{a}_k(z)] \tag{3.2.51}$$

$$\tilde{s}_k(z)=\frac{1}{2}[a_k(z)-\check{a}_k(z)] \tag{3.2.52}$$

这样定义的多项式 $s_k(z)$ 和 $\tilde{s}_k(z)$ 分别称为 Hermitian Levinson 多项式和反 Hermitian Levinson 多项式。然而，利用式 (3.2.51) 或者式 (3.2.52) 的定义，并不能够使 $s_k(z)$ 或者 $\tilde{s}_k(z)$ 的递推计算简化。

Levinson 多项式满足线性方程组

$$\boldsymbol{T}_k\boldsymbol{a}_k=(D_k/D_{k-1})[1,0,\cdots,0]^{\mathrm{T}}, \qquad k=1,2,\cdots,n \tag{3.2.53}$$

利用式 (3.2.51) 和式 (3.2.53) 容易验证，多项式 $s_k(z)$ 满足

$$\boldsymbol{T}_k\boldsymbol{s}_k=\alpha_k(D_k/D_{k-1})[1,0,\cdots,0,1]^{\mathrm{T}}, \qquad k=1,2,\cdots,n \tag{3.2.54}$$

类似地，由式 (3.2.52) 和式 (3.2.53) 知，多项式 $\tilde{s}_k(z)$ 满足

$$\boldsymbol{T}_k\tilde{\boldsymbol{s}}_k=\alpha_k(D_k/D_{k-1})[1,0,\cdots,0,-1]^{\mathrm{T}}, \qquad k=1,2,\cdots,n \tag{3.2.55}$$

式中，$\boldsymbol{s}_k=[s_0^{(k)},s_1^{(k)},\cdots,s_k^{(k)}]^{\mathrm{T}}$ 和 $\tilde{\boldsymbol{s}}_k=[\tilde{s}_0^{(k)},\tilde{s}_1^{(k)},\cdots,\tilde{s}_k^{(k)}]^{\mathrm{T}}$ 分别是多项式 $s_k(z)$ 和 $\tilde{s}_k(z)$ 的系数向量。

注意，式 (3.2.53)～ 式 (3.2.55) 的右边均是实的，并且式 (3.2.54) 右边是对称的，式 (3.2.55) 右边是反对称的。

现在考虑 Hermitian Levinson 多项式 $s_k(z)$ 的递推。利用 $a_{k-1}(z)$ 表示 $s_k(z)$ 的最常见形式，即

$$s_k(z)=x_{k-1}a_{k-1}(z)+zx_{k-1}^*\check{a}_{k-1}(z) \tag{3.2.56}$$

其中，x_{k-1} 是一个复标量。观察知，$s_k(z)=\check{s}_k(z)$，因此，式 (3.2.56) 的定义满足 $s_k(z)$ 是 Hermitian Levinson 多项式的要求。还容易验证

$$s_k(z)=\alpha_k a_k(z)+\alpha_k^*\check{a}_k(z), \qquad k=1,2,\cdots \tag{3.2.57}$$

其中

$$\alpha_k=(x_{k-1}-x_{k-1}^*\beta_k^*)/(1-|\beta_k|^2) \tag{3.2.58}$$

这一表达式建立了相同阶次的多项式 $s_k(z)$ 与 $a_k(z)$ 之间的联系。注意，将式 (3.2.56) 代入 $T_k s_k$，并使用式 (3.2.53)，则得到式 (3.2.54) 所示的关系。因此，式 (3.2.54) 的定义是合适的。

为了建立 $s_k(z)$ 的递推公式，将式 (3.2.57) 向后迭代一步，并联合求解该式与式 (3.2.56) 得到 $a_{k-1}(z)$ 和 $\check{a}_{k-1}(z)$。将这些值连同用 $s_{k+1}(z)$ 和 $s_k(z)$ 表示的 $a_k(z)$ 一起代入式 (3.2.48)，便得到

$$\frac{s_{k+1}-z\mu_k^* s_k(z)}{x_k-zx_k^*\rho_k}=\left[\frac{s_k(z)-z\mu_{k-1}^* s_{k-1}(z)}{x_{k-1}-zx_{k-1}^*\rho_{k-1}}\right]+z\beta_k\left[\frac{s_k(z)-z\mu_{k-1}s_{k-1}(z)}{zx_{k-1}^*-x_{k-1}\rho_{k-1}^*}\right] \tag{3.2.59}$$

其中

$$\rho_k=\alpha_k/\alpha_k^*,\qquad \mu_k=x_k/\alpha_k \tag{3.2.60}$$

选择复标量 $x_k=\alpha_k, k=1,2,\cdots$，则式 (3.2.59) 简化为

$$\frac{s_{k+1}-zs_k(z)}{x_k-zx_k}=\left[\frac{s_k(z)-zs_{k-1}(z)}{x_{k-1}-zx_{k-1}}\right]+z\beta_k\left[\frac{s_k(z)-s_{k-1}(z)}{zx_{k-1}^*-x_{k-1}^*}\right] \tag{3.2.61}$$

由式 (3.2.58)，对 x_k 的上述选择还将迫使下列关系式成立：

$$x_k=(x_{k-1}-x_{k-1}^*\beta_k^*)/(1-|\alpha_k|^2) \tag{3.2.62}$$

从式 (3.2.61) 解出 $s_{k+1}(z)$，并利用式 (3.2.62) 进行简化，便得到 $s_k(z)$ 的“二步递推关系”：

$$s_{k+1}(z)=(p_k+p_k^*z)s_k(z)-q_kzs_{k-1}(z) \tag{3.2.63}$$

式中

$$p_k=x_k/x_{k-1},\qquad q_k=\left|x_k/x_{k-1}\right|^2(1-|\beta_k|^2) \tag{3.2.64}$$

式 (3.2.63) 可以进一步简化，方法是定义一个新的多项式 $\bar{s}_k(z)$，即 $s_k(z)=l_k\bar{s}_k(z)$，$k=1,2,\cdots$，其中，l_k 为实的标量。这样一来，式 (3.2.63) 就变成

$$\bar{s}_{k+1}(z)=(l_k/l_{k+1})(p_k+p_k^*z)\bar{s}_k(z)-(l_{k-1}/l_{k+1})q_kz\bar{s}_{k-1}(z) \tag{3.2.65}$$

选择 l_{k-1},l_k 和 l_{k+1}，使得式 (3.2.65) 中 $\bar{s}_{k-1}(z)$ 的实系数等于 1，即

$$l_{k+1}^{-1}=(l_{k-1}q_k)^{-1}=l_{k-1}^{-1}(|x_{k-1}/x_k|^2)(1-|\beta_k|^2)^{-1} \tag{3.2.66}$$

将式 (3.2.66) 代入式 (3.2.65)，则有

$$\bar{s}_{k+1}=\frac{l_k}{l_{k-1}(1-|\beta_k|^2)}(p_k^{*-1}+p_k^{-1}z)\bar{s}_k(z)-z\bar{s}_{k-1}(z) \tag{3.2.67}$$

定义复标量 τ_k 满足

$$\boldsymbol{T}_k\boldsymbol{s}_k=[\tau_k,0,\cdots,0,\tau_k^*]^{\mathrm{T}} \tag{3.2.68}$$

比较式 (3.2.68) 与式 (3.2.54) 知 $\tau_k=\alpha_k(D_k/D_{k-1})$。于是，再利用式 (3.2.58)，便得到

$$\begin{aligned}\tau_k&=\alpha_k(D_k/D_{k-1})\\&=(x_{k-1}-x_{k-1}^*\beta_k^*)(D_k/D_{k-1})(1-|\beta_k|^2)^{-1}\end{aligned} \tag{3.2.69}$$

将式 (3.2.64) 和式 (3.2.69) 代入式 (3.2.67)，即求得 $\bar{s}_k(z)$ 的递推公式为

$$\bar{s}_{k+1}(z) = \left(\frac{\bar{\tau}_{k-1}^*}{\bar{\tau}_k^*} + \frac{\bar{\tau}_{k-1}}{\bar{\tau}_k}z\right)\bar{s}_k(z) - z\bar{s}_{k-1}(z) \tag{3.2.70}$$

其中

$$\bar{\tau}_k = \tau_k/l_k \tag{3.2.71}$$

这是因为 $s_k(z) = l_k\bar{s}_k(z)$ 意味着 $\tau_k = l_k\bar{\tau}_k$。

式 (3.2.70) 是 Hermitian Levinson 多项式递推的关键公式，是 Krishan 与 Morgera 得到的 [262]。很明显，式 (3.2.70) 与分基 (实) Levinson 递推公式 (3.2.39) 形式上非常相似。因此，式 (3.2.70) 可以视为式 (3.2.39) 在复数情况下的推广与修正。

在利用式 (3.2.70) 递推出 $\bar{s}_k(z)$ 之后，立即可得到原多项式 $s_k(z) = l_k\bar{s}_k(z)$，因为 l_k 可以由式 (3.2.66) 直接计算。

为了由 $s_k(z)$ 恢复 $a_k(z)$，考查式 (3.2.57) 的向前一步迭代。将此结果与式 (3.2.56) 综合起来，则有

$$a_k(z) = \frac{s_{k+1}(z) - zs_k(z)}{x_k - zx_k} \tag{3.2.72}$$

它实质上就是式 (3.2.61) 的左边。预测参数多项式 $a_k(z)$ 的恢复如此简单，主要得益于在式 (3.2.53) 中引入了复标量 x_{k-1}，并作了一个非常好的选择 $x_k = \alpha_k, k = 1, 2, \cdots, n$。观察式 (3.2.72)，可以得到一个非常有趣的结果，即 $s_{k+1}(1) = s_k(1), k = 0, 1, \cdots, n$。选择 $x_k = \alpha_k, k = 1, 2, \cdots, n$ 带来的另外一个有趣的关系是

$$\tau_k = x_k(D_k/D_{k-1}) \tag{3.2.73}$$

此式由式 (3.2.61) 和式 (3.2.69) 直接可得。

另外，由式 (3.2.69) 和式 (3.2.71)，又可得到恢复反射系数 β_k 的公式为

$$\beta_k = \frac{x_{k-1}^*}{x_{k-1}}\left(1 - \frac{\bar{\tau}_k^*}{\bar{\tau}_{k-1}^*}\frac{l_k}{l_{k-1}}\right) \tag{3.2.74}$$

综合以上结果，可以总结出下面的 Hermitian Levinson 算法 [262]。

算法 3.2.3 (Hermitian Levinson 算法)

步骤 1　初始化

$$s_0(z) = 1 = \bar{s}_0(z), \quad s_1(z) = 0.5(1+z) = \bar{s}_1(z),$$
$$\bar{\tau}_0 = c_0/2, \quad x_0 = 0.5, \quad l_0 = l_1 = 1, \quad k = 1$$

步骤 2　计算系数

$$\bar{\tau}_k = \sum_{i=0}^{k} c_i^* \bar{s}_{k,i}$$
$$r_k = \bar{\tau}_{k-1}/\bar{\tau}_k$$

步骤 3 多项式更新

$$\bar{s}_{k+1}(z)=(r_k^*+r_kz)\bar{s}_k(z)-z\bar{s}_{k-1}(z),\quad \text{存储 } \bar{s}_{k+1}(z),\bar{s}_k(z)$$

步骤 4 辅助递推

$$\begin{aligned}\beta_k&=\frac{x_{k-1}^*}{x_{k-1}}\left(1-\frac{\bar{\tau}_k^*}{\bar{\tau}_{k-1}^*}\times\frac{l_k}{l_{k-1}}\right)\\ \delta_k&=(1-|\beta_k|^2)^{-1}\\ x_k&=(x_{k-1}-x_{k-1}^*\beta_k^*)\delta_k\\ l_{k+1}^{-1}&=(l_{k-1}q_k)^{-1}=l_{k-1}^{-1}(|x_{k-1}/x_k|^2)\delta_k\end{aligned}$$

步骤 5 高一阶递推

$k\leftarrow k+1$，返回步骤 3，并重复以上步骤，直至 $k=n$。

步骤 6 Levinson 恢复

$$a_n(z)=(1/x_n)[l_{n+1}\bar{s}_{n+1}(z)-zl_n\bar{s}_n(z)](1-z)$$

与 Hermitian Levinson 算法的推导相类似，可以导出反 Hermitian Levinson 算法。在这种情况下，有

$$\tilde{s}_k(z)=x_{k-1}a_{k-1}(z)-zx_{k-1}^*\check{a}_{k-1}(z)=\alpha_ka_k(z)-\alpha_k^*\check{a}_k(z)=-\check{s}_k(z)\tag{3.2.75}$$

其中

$$\alpha_k=(x_{k-1}+x_{k-1}^*\beta_k^*)/(1-|\beta_k|^2)\tag{3.2.76}$$

对反 Hermitian Levinson 算法推导有兴趣的读者可进一步参考文献 [262]。

3.2.5 多信道 Toeplitz 线性方程组的 Levinson 递推求解

现在讨论多信道 Toeplitz 线性方程组的递推求解。

考虑二维 AR(p_1,p_2) 实值随机过程

$$\sum_{i_1=0}^{p_1}\sum_{i_2=0}^{p_2}a(i_1,i_2)x(n_1,-i_1,n_2-i_2)=e(n_1,n_2)\tag{3.2.77}$$

式中，$a(i_1,i_2)$ 称为二维 AR 参数，激励信号 $e(n_1,n_2)$ 是一个二维高斯白噪声随机过程。

定义 $r(l,k)=\mathrm{E}\{x(n_1,n_2)x(n_1-l,n_2-k)\}$ 为二维 AR 过程 $x(n_1,n_2)$ 的自协方差函数。对于二维 AR 过程，有多信道 Yule-Walker 方程 (推导及其涵义详见文献 [254])

$$[\boldsymbol{I},\boldsymbol{A}_1,\cdots,\boldsymbol{A}_n]\boldsymbol{\Gamma}=[\boldsymbol{A}_n,\boldsymbol{O},\cdots,\boldsymbol{O}]\tag{3.2.78}$$

式中，$\boldsymbol{A}_1,\cdots,\boldsymbol{A}_n$ 为参数矩阵，$\boldsymbol{\Gamma}$ 是 $(n+1)(K+1)\times(n+1)(K+1)$ 维 Toeplitz- 块 Toeplitz 矩阵，即

$$\boldsymbol{\Gamma}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}(0)&\boldsymbol{R}(1)&\cdots&\boldsymbol{R}(n)\\ \boldsymbol{R}(-1)&\boldsymbol{R}(0)&\cdots&\boldsymbol{R}(n-1)\\ \vdots&\vdots&&\vdots\\ \boldsymbol{R}(-n)&\boldsymbol{R}(-n+1)&\cdots&\boldsymbol{R}(0)\end{bmatrix}\tag{3.2.79}$$

分块矩阵 $\boldsymbol{R}(l), l=0,1,\cdots,n$ 为 Toeplitz 矩阵，定义为

$$\boldsymbol{R}(l)=\begin{bmatrix} r(l,0) & r(l,-1) & \cdots & r(l,-K) \\ r(l,1) & r(l,0) & \cdots & r(l,-K+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ r(l,K) & r(l,K-1) & \cdots & r(l,0) \end{bmatrix} \tag{3.2.80}$$

其元素 $r(i,j)$ 为二维自协方差函数。

多信道 Yule-Walker 方程在多维信号处理的二维 AR 模型辨识和谱估计中起着关键的作用。Kimura 与 Honoki [254] 提出了求解 Toeplitz- 块 Toeplitz 矩阵方程 (3.2.78) 的多信道 Levinson 递推算法。

算法 3.2.4 (多信道 Levinson 递推算法) [254]

步骤 1　初始化

$$\Lambda_0=R(0), \qquad A_0^{(0)}=I \tag{3.2.81}$$

步骤 2　阶数更新

$$\boldsymbol{\Delta}_{n+1}=\sum_{i=0}^{n}\boldsymbol{A}_i^{(n)}\boldsymbol{R}(n-i+1) \tag{3.2.82}$$

$$\boldsymbol{A}_{n+1}^{(n+1)}=-\boldsymbol{\Delta}_{n+1}\boldsymbol{J}\boldsymbol{\Lambda}_n^{-1}\boldsymbol{J} \tag{3.2.83}$$

$$\boldsymbol{A}_i^{(n+1)}=\boldsymbol{A}_i^{(n)}+\boldsymbol{A}_{n+1}^{(n+1)}\boldsymbol{J}\boldsymbol{A}_{n-i+1}^{(n)}\boldsymbol{J}, \qquad i=1,2,\cdots,n \tag{3.2.84}$$

$$\boldsymbol{A}_0^{(n+1)}=\boldsymbol{I} \tag{3.2.85}$$

$$\boldsymbol{\Lambda}_{n+1}=\boldsymbol{\Lambda}_n+\boldsymbol{A}_{n+1}^{(n+1)}\boldsymbol{\Delta}_{n+1}^{\mathrm{T}} \tag{3.2.86}$$

其中，$\boldsymbol{J}$ 表示互换矩阵。

这种算法原来是针对二维最大熵谱估计提出的。Kimura 与 Honoki 提出了一个猜测：对于某些情况，最终的谱估计会与最大熵谱估计一致。虽然多信道 Levinson 递推算法求解 Toeplitz 线性方程组是有效的，但 Zhang 和 Cui[504] 通过性能分析证明，Kimura 与 Honoki 的这一猜测并不成立。

3.3　求解 Toeplitz 线性方程组的快速算法

上一节推导了求解 Toeplitz 线性方程组 $\boldsymbol{Tx}=\boldsymbol{b}$ (其中，$\boldsymbol{T}=[\mu_{i-j}]_{i,j=0}^{n}$) 的几种 Levinson 型递推算法。虽然这些算法是递推的，但它们的计算复杂度为 $O(n^2)$。除了 Levinson 递推外，也可以利用快速 Fourier 变换 (FFT) 求解 Toeplitz 线性方程组，而且这类算法只需要 $O(n\log_2 n)$ 的计算复杂度，比 Levinson 递推更快速。鉴于此，多数文献称这种求解 Toeplitz 线性方程组的快速 Fourier 变换为快速算法 (如文献 [263]，[108] 等)，个别文献 [16] 称这类算法为超快速算法。本节主要介绍 Kumar 的快速算法 [263]。

Kumar 快速算法包括下面的三步运算：

(1) 将 Toeplitz 矩阵先镶嵌成一个大的循环矩阵。

(2) 对循环矩阵部分求逆 (由于循环矩阵的逆矩阵仍是循环矩阵，所以只需要求其逆矩阵的第 1 行和第 1 列)。然后，利用循环矩阵逆矩阵的第 1 行和第 1 列再对原 Toeplitz 矩阵部分求逆，即只求 Toeplitz 矩阵的逆矩阵的第 1 行和第 1 列。

(3) 利用 Toeplitz 矩阵的逆矩阵的第 1 行和第 1 列，求解原 Toeplitz 线性方程组。

下面分别叙述这三步运算。

3.3.1 循环镶嵌

令 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{P} = [\mu_{i-j}]_{i,j=0}^{n}$。这个 $(n+1)\times(n+1)$ 矩阵可以镶嵌成一个 $(2n+1)\times(2n+1)$ 维矩阵，它既是 Toeplitz 矩阵，又是循环 (右移位) 矩阵，即有

$$\bar{\boldsymbol{P}} = \begin{bmatrix} \mu_0 & \mu_{-1} & \mu_{-2} & \cdots & \mu_{-n} & \mu_n & \mu_{n-1} & \mu_{n-2} & \cdots & \mu_1 \\ \mu_1 & \mu_0 & \mu_{-1} & \cdots & \mu_{-n+1} & \mu_{-n} & \mu_n & \mu_{n-1} & \cdots & \mu_2 \\ \mu_2 & \mu_1 & \mu_0 & \cdots & \mu_{-n+2} & \mu_{-n+1} & \mu_{-n} & \mu_n & \cdots & \mu_3 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mu_{-1} & \mu_{-2} & \mu_{-3} & \cdots & \mu_n & \mu_{n-1} & \mu_{n-2} & \mu_{n-3} & \cdots & \mu_0 \end{bmatrix} \tag{3.3.1}$$

这一过程称为循环镶嵌 (cyclic embedding)。用 $\bar{\boldsymbol{p}}_{(1)}$ 表示循环矩阵 $\bar{\boldsymbol{P}}$ 的第 1 行，则

$$\bar{\boldsymbol{p}}_{(1)} = [\mu_0, \mu_{-1}, \cdots, \mu_{-n}, \mu_n, \mu_{n-1}, \cdots, \mu_1]$$

类似地，用 $\bar{\boldsymbol{p}}^{(1)}$ 表示 $\bar{\boldsymbol{P}}$ 的第 1 列。假定循环矩阵 $\bar{\boldsymbol{P}}$ 是非奇异的，则它的逆矩阵 $\bar{\boldsymbol{Q}}$ 也是循环矩阵。因此，逆矩阵 $\bar{\boldsymbol{Q}}$ 的不同列 (行) 是它的第 1 列 (行) 的循环移位。有意思的是，$\bar{\boldsymbol{Q}}$ 的第 1 行 $\bar{\boldsymbol{q}}_{(1)}$ 可以用 $N\log_2 N(N=2n+1)$ 次运算求出。

乘积矩阵 $\boldsymbol{Z} = \bar{\boldsymbol{P}}\bar{\boldsymbol{Q}}$ 的第 1 行 $\boldsymbol{z}_{(1)}$ 的第 j 个元素是 $\bar{\boldsymbol{p}}_{(1)}$ 的元素与逆矩阵 $\bar{\boldsymbol{Q}}$ 的第 j 列 $\bar{\boldsymbol{q}}^{(j)}$ 的元素的乘积，但由于 $\bar{\boldsymbol{q}}^{(j)}$ 是 $\bar{\boldsymbol{q}}^{(1)}$ 的 k 次循环移位，故

$$\boldsymbol{z}_{(1)}(j) = \sum_{k=0}^{N-1} \bar{\boldsymbol{p}}_{(1)}(k)\bar{\boldsymbol{q}}^{(1)}(k-j), \quad j=0,1,\cdots,N-1 \tag{3.3.2}$$

即 $\boldsymbol{z}_{(1)}(j)$ 是 $\bar{\boldsymbol{p}}_{(1)}$ 的元素与 $\bar{\boldsymbol{q}}^{(1)}$ 的元素的循环相关。在上述表达式中，不同阵列 (行或列) 的元素编号为 $0,1,\cdots,N-1$，以便与 FFT 的符号规定一致，而且 $\bar{\boldsymbol{q}}^{(1)}(-i) = \bar{\boldsymbol{q}}^{(1)}(N-i)$。考虑到矩阵 $\bar{\boldsymbol{Q}}$ 的循环移位性质，其第 1 行 $\bar{\boldsymbol{q}}_{(1)}$ 的元素与它的第 1 列 $\bar{\boldsymbol{q}}^{(1)}$ 的元素之间有以下关系：

$$\bar{\boldsymbol{q}}_{(1)}(j) = \bar{\boldsymbol{q}}^{(1)}(N-j), \quad j=0,1,\cdots,N-1 \tag{3.3.3}$$

利用这一关系，式 (3.3.2) 又可以写作

$$\boldsymbol{z}_{(1)}(j) = \sum_{k=0}^{N-1} \bar{\boldsymbol{p}}_{(1)}(k)\bar{\boldsymbol{q}}_{(1)}(j-k), \quad j=0,1,\cdots,N-1 \tag{3.3.4}$$

根据定义，$\boldsymbol{Z} = \bar{\boldsymbol{P}}\bar{\boldsymbol{Q}}$ 应该为单位矩阵，故 $\boldsymbol{z}_{(1)} = [1,0,\cdots,0]$。用 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 分别表示 $\bar{\boldsymbol{p}}_{(1)}$ 和 $\bar{\boldsymbol{q}}_{(1)}$ 的离散 Fourier 变换 (DFT)，则 $\bar{\boldsymbol{q}}_{(1)}$ 是 $\boldsymbol{v}$ 的离散 Fourier 反变换 (IDFT)。对式 (3.3.4)

进行 DFT，可得向量 $\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{u}$ 的元素之间的关系：

$$v(k) = 1/u(k), \quad k = 0, 1, \cdots, N-1$$

由于假定了 $\bar{\boldsymbol{P}}$ 的可逆性，所以 $u(k) \neq 0, \forall k$，即所有元素 $v(k)$ 都是有限大的。在求出 $v(k)$ 后，$\bar{q}_{(1)}$ 便可以通过 $\boldsymbol{v}$ 的 IDFT 得到。

第一步的计算可以归纳如下。

算法 3.3.1 (镶嵌算法)

步骤 1　计算镶嵌序列 $[\mu_0, \mu_{-1}, \cdots, \mu_{-n}, \mu_n, \cdots, \mu_1]$ 的 $(2n+1)$ 点 FFT，得到 $\boldsymbol{u}(k), k = 0, 1, \cdots, 2n$。

步骤 2　计算 $\boldsymbol{v}(k) = 1/\boldsymbol{u}(k), k = 0, 1, \cdots, 2n$。

步骤 3　求 $\boldsymbol{v}(k)$ 的 IDFT，即得到循环矩阵 $\bar{\boldsymbol{P}}$ 的逆矩阵 $\bar{\boldsymbol{Q}}$ 的第 1 行。

步骤 4　利用式 (3.3.3) 对 $\bar{\boldsymbol{Q}}$ 的第 1 行进行移位，直接得到 $\bar{\boldsymbol{Q}}$ 的第 1 列 $\bar{q}^{(1)}$。

3.3.2 Toeplitz 矩阵的部分求逆

利用上述算法求出循环矩阵的逆矩阵 $\bar{\boldsymbol{Q}}$ 后，下一步是求原 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{Q}$。这一步骤由以下两个算法组成。

算法 3.3.2 (半除算法) [263]

假定 $a_0(z)$ 和 $a_1(z)$ 是最高为 n 次的多项式，它们每一个都有 $n+1$ 个项 (除常数项以外的所有项可以等于零)。下面的算法用递推的方法给出算子 $\hat{\Phi}_{n,\nu}$，其中，$\left\lfloor \frac{n+1}{2} \right\rfloor \leqslant \nu + 1 \leqslant n$ (符号 $\lfloor x \rfloor$ 表示取不小于 x 的最小整数)。

if $n = 1$; $a_0(z) = a_{0,1}z + a_{0,0}$; $a_1(z) = a_{1,1}z + a_{1,0}$ then

$$\hat{\psi} \leftarrow \mathrm{HD}(a_0, a_1, n, \nu) = \begin{bmatrix} 1 & -a_{0,1}/a_{1,0} \\ -a_{1,1}/a_{0,0} & 1 \end{bmatrix}, \text{ return } \hat{\psi}$$

else

begin

$a_0 = b_0 z^{n-m+1} + c_0 x^m + d_0$

$a_1 = b_1 z^{n-m+1} + c_1 z^m + d_1$

$m = \min\left\{ \left\lfloor \frac{n+1}{3} \right\rfloor, (n-\nu) \right\}$

$e_0 = b_0 z^m + d_0$

$e_1 = b_1 z^m + d_1$

$\widehat{\psi} \leftarrow \mathrm{HD}(e_0, e_1, 2m-1, m-1)$

if $m = (n-\nu)$ then return $\hat{\psi}$

else

begin

$$\begin{bmatrix} f_0 \\ f_1 \end{bmatrix} \leftarrow (\widehat{\psi} \otimes T_n) \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \end{bmatrix}$$

$\bar{m} = (n+1-m) - (\nu+1)$

$f_0 = q_0 z^{\bar{n}-\bar{m}+1} + r_0 z^{\bar{m}} + s_0, \quad \bar{n} = n - m$

$f_1 = q_1 z^{\bar{n}-\bar{m}+1} + r_1 z^{\bar{m}} + s_1$

$g_0 = q_0 z^{\bar{m}} + s_0$

$g_1 = q_1 z^{\bar{m}} + s_1$

$\hat{S} \leftarrow \mathrm{HD}(g_0, g_1, 2\bar{m}-1, \bar{m}-1)$

$\hat{\Phi} = \hat{S} \odot \hat{\psi}$

return $\hat{\Phi}$

end

end

上述算法中，$\hat{\psi} \otimes T_n$ 表示在 $\hat{\psi}$ 的交叉对角线元素插入反转算子 T_n，即

$$\hat{\psi} \otimes T_n = \begin{bmatrix} 1 & \psi_{12}T_n \\ \psi_{21}T_n & 1 \end{bmatrix}$$

而 $\hat{S} \odot \hat{\psi}$ 等价为在矩阵 $\hat{S}$ 的交叉对角线元素插入移位算子 S 后与矩阵 $\hat{\psi}$ 相乘，即

$$\hat{S} \odot \hat{\psi} = \begin{bmatrix} 1 & s_{12}S \\ s_{21}S & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & \psi_{12} \\ \psi_{21} & 1 \end{bmatrix}$$

算法 3.3.3 (Toeplitz 矩阵部分求逆算法) [263]

步骤 1　用算法 3.3.1 求 $\bar{\boldsymbol{Q}}$ 的第 1 行 $[f_{\bar{n},0}, f_{\bar{n},1}, \cdots, f_{\bar{n},\bar{n}}]$ 和第 1 列 $[g_{\bar{n},0}, g_{\bar{n},1}, \cdots, g_{\bar{n},\bar{n}}]$。

步骤 2　利用算法 3.3.2 计算 $\hat{\Phi}_{\bar{n},n} = \mathrm{HD}(f_{\bar{n}}(z), g_{\bar{n}}(z), \bar{n}, n)$。

步骤 3　计算 $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{P}^{-1}$ 的第 1 行 $\bar{f}_n(z)$ 和第 1 列 $\bar{g}_n(z)$:

$$\begin{bmatrix} \bar{f}_n(z) \\ \bar{g}_n(z) \end{bmatrix} = (\widehat{\Phi}_{\bar{n},n} \otimes T_{\bar{n}}) \begin{bmatrix} f_{\bar{n}}(z) \\ g_{\bar{n}}(z) \end{bmatrix}$$

3.3.3 Toeplitz 线性方程组求解

Toeplitz 线性方程组 $\boldsymbol{Px} = \boldsymbol{b}$ 的解由 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{Qb}$ 给出，其中，$\boldsymbol{b} = [b_0, b_1, \cdots, b_n]^{\mathrm{T}}$ 为已知。构造逆矩阵 $\boldsymbol{Q}_{n+1}$ (或 $\boldsymbol{Q}_n$) 的自重生 (self-regenerative) 算法为 [449]

$$(\boldsymbol{Q}_{n+1})_{i+1,j+1} = (Q_{n+1})_{i,j} + (Q_{11}^{-1}\boldsymbol{Q}_{21}Q_{12} - Q_{11}^{-1}\check{Q}_{12}^{\mathrm{T}}\check{Q}_{21}^{\mathrm{T}})_{i,j}, \quad 1 \leqslant i, j \leqslant n \tag{3.3.5}$$

然而，下面将看到，只用 $\boldsymbol{Q}$ 的第 1 行和第 1 列就可以获得解 $\boldsymbol{x}$，而无需利用式 (3.3.5) 求出整个矩阵 $\boldsymbol{Q}$。

令 $\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}} = [\bar{f}_0, \bar{f}_1, \cdots, \bar{f}_n]$ 和 $\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}} = [\bar{g}_0, \bar{g}_1, \cdots, \bar{g}_n]$ 分别是逆矩阵 $\boldsymbol{Q}_{n+1}$ 的第 1 行和第 1 列 (为了简便，简记 $\bar{f}_i = \bar{f}_{n,i}$ 和 $\bar{g}_i = \bar{g}_{n,i}$)。于是，有

$$\boldsymbol{f}^{\mathrm{T}} = [f_0, \boldsymbol{Q}_{12}], \qquad \boldsymbol{g}^{\mathrm{T}} = [g_0, \boldsymbol{Q}_{21}], \qquad f_0 = g_0$$

定义 $(2n+1)$ 维向量

$$\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}} = [g_n, \cdots, g_1, f_0, f_1, \cdots, f_n] \tag{3.3.6}$$

$$\tilde{\boldsymbol{f}}^{\mathrm{T}} = [0, \cdots, 0, \tilde{f}_1, \tilde{f}_2, \cdots, \tilde{f}_n], \quad \tilde{f}_i = f_i/f_0, \quad 1 \leqslant i \leqslant n \tag{3.3.7}$$

$$\tilde{\boldsymbol{g}}^{\mathrm{T}} = [0, \cdots, 0, \tilde{g}_1, \tilde{g}_2, \cdots, \tilde{g}_n], \quad \tilde{g}_i = g_i/g_0, \quad 1 \leqslant i \leqslant n \tag{3.3.8}$$

$$\tilde{\boldsymbol{b}}^{\mathrm{T}} = [0, \cdots, 0, b_0, b_1, \cdots, b_n] \tag{3.3.9}$$

用 S_c 表示右循环移位算子。于是，矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 由下列 $(n+1) \times (2n+1)$ 矩阵 $\tilde{\boldsymbol{Q}}$ 的最右边 $(n+1)$ 列组成，即

$$\tilde{\boldsymbol{Q}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{h}^{\mathrm{T}} \\ S_c\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}} + g_1\tilde{\boldsymbol{f}}^{\mathrm{T}} - \bar{f}_n\tilde{\boldsymbol{g}}^{\mathrm{T}} \\ S_c^2\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}} + (\bar{g}_1 S_c + \bar{g}_2)\tilde{\boldsymbol{f}}^{\mathrm{T}} - (\bar{f}_n S_c + \bar{f}_{n-1})\tilde{\boldsymbol{g}}^{\mathrm{T}} \\ S_c^3\boldsymbol{h}^{\mathrm{T}} + (\bar{g}_1 S_c^2 + \bar{g}_2 S_c + \bar{g}_3)\tilde{\boldsymbol{f}}^{\mathrm{T}} - (\bar{f}_n S_c^2 + \bar{f}_{n-1} S_c + \bar{f}_{n-2})\tilde{\boldsymbol{g}}^{\mathrm{T}} \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{3.3.10}$$

用 $\bar{\boldsymbol{u}} = \bar{\boldsymbol{b}} * \boldsymbol{h}, \bar{v} = \bar{\boldsymbol{b}} * \tilde{\boldsymbol{f}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{w}} = \bar{\boldsymbol{b}} * \tilde{\boldsymbol{g}}$ 分别表示 $\bar{\boldsymbol{b}}$ 与 $\boldsymbol{h}, \tilde{\boldsymbol{f}}, \tilde{\boldsymbol{g}}$ 的循环相关。注意，$\boldsymbol{b}$ 与 $\boldsymbol{h}$ 之间的循环相关对应于 $\bar{\boldsymbol{b}}$ 与 $\bar{\boldsymbol{h}}$ 之间的循环卷积，其中，$\bar{\boldsymbol{h}}$ 是 $\boldsymbol{h}$ 元素的反转形式，即 $\bar{h}(0) = h(0), \bar{h}(i) = h(n-i),\ i = 1, 2, \cdots, n-1$。用 $\boldsymbol{u}$ 表示 $\bar{\boldsymbol{u}}$ 的前 $n+1$ 个元素，$\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{w}$ 分别表示 $\bar{\boldsymbol{v}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{w}}$ 的前 n 个元素，则解 $\boldsymbol{x}$ 由 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{b} = \tilde{\boldsymbol{Q}}\bar{\boldsymbol{b}}$ 给出，即有

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} u_1 + g_1 v_0 - f_n w_0 \\ u_2 + g_1 v_1 + g_2 v_2 - (f_n w_1 + f_{n-1} w_0) \\ u_3 + g_1 v_2 + g_2 v_1 + g_3 v_0 - (f_n w_2 + f_{n-1} w_1 + f_{n-2} w_0 \\ \vdots \end{bmatrix} \tag{3.3.11}$$

定义 $\tilde{\boldsymbol{v}}$ 和 $\tilde{\boldsymbol{w}}$ 分别是向量 $\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{w}$ 经过补零的 $(2n+1)$ 维增广向量，即

$$\tilde{\boldsymbol{v}}^{\mathrm{T}} = [0, \cdots, 0, v_0, \cdots, v_{n-1}], \qquad \tilde{\boldsymbol{w}}^{\mathrm{T}} = [0, \cdots, 0, w_0, \cdots, w_{n-1}]$$

并用 $\bar{\boldsymbol{\xi}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{\eta}}$ 表示循环相关 $\bar{\boldsymbol{\xi}} = \tilde{\boldsymbol{g}}^* \tilde{\boldsymbol{v}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{\eta}} = \tilde{\boldsymbol{f}}^* \tilde{\boldsymbol{w}}$，即 $\bar{\boldsymbol{\xi}}, \bar{\boldsymbol{\eta}}$ 的第 j 个元素 $\bar{\xi}(j), \bar{\eta}(j)$ 分别为

$$\bar{\xi}(j) = \sum_{i=0}^{n-1} \tilde{g}(i)\tilde{v}(i-j), \quad \tilde{v}(i) = \tilde{v}(n-i), \quad j = 0, 1, \cdots, n-1 \tag{3.3.12}$$

$$\bar{\eta}(j) = \sum_{i=0}^{n-1} \tilde{f}(i)\tilde{w}(i-j), \quad \tilde{w}(i) = \tilde{w}(n-i), \quad j = 0, 1, \cdots, n-1 \tag{3.3.13}$$

直接计算相关项得

$$\bar{\xi}(n) = 0, \quad \bar{\xi}(j) = (\tilde{g}_{n-i}v_0 + \tilde{g}_{n-i+1}v_1 + \cdots + \tilde{g}_1 v_{n-j-1}), \quad 0 \leqslant j \leqslant n-1 \tag{3.3.14}$$

$$\bar{\eta}(n) = 0, \quad \bar{\eta}(j) = (\tilde{f}_{n-i}w_0 + \tilde{f}_{n-i+1}w_1 + \cdots + \tilde{f}_1 w_{n-j-1}), \quad 0 \leqslant j \leqslant n-1 \tag{3.3.15}$$

容易验证，$\boldsymbol{P}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的解直接由

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{u} + (\hat{\boldsymbol{\xi}} - \hat{\boldsymbol{\eta}})\bar{f}_0$$

给出，其中，$\hat{\boldsymbol{\xi}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{\eta}}$ 分别表示 $\bar{\boldsymbol{\xi}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{\eta}}$ 的前 $(n+1)$ 个元素，并按照与 $\bar{\boldsymbol{\xi}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{\eta}}$ 相反的顺序进行排列的向量，即 $\hat{\boldsymbol{\xi}}=[\bar{\xi}_n,\bar{\xi}_{n-1},\cdots,\bar{\xi}_1,\bar{\xi}_0]$ 和 $\hat{\boldsymbol{\eta}}=[\bar{\eta}_n,\bar{\eta}_{n-1},\cdots,\bar{\eta}_1,\bar{\eta}_0]$。

下面是第三步 (Toeplitz 线性方程组 $\boldsymbol{Px}=\boldsymbol{b}$) 的求解算法。

算法 3.3.4 (Toeplitz 线性方程组求解算法)

步骤 1　用算法 3.3.1~3.3.3 计算出逆矩阵 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{P}^{-1}$ 的第 1 行 $\bar{f}_n(z)$ 和第 1 列 $\bar{g}_n(z)$。

步骤 2　利用 $\bar{f}_n(z)$ 和 $\bar{g}_n(z)$ 的系数和式 (3.3.9) 定义 $(2n+1)$ 维向量 $\boldsymbol{h},\tilde{\boldsymbol{f}},\tilde{\boldsymbol{g}}$。

步骤 3　计算循环相关 $\bar{\boldsymbol{u}}=\bar{\boldsymbol{b}}*\boldsymbol{h};\bar{\boldsymbol{v}}=\bar{\boldsymbol{b}}*\tilde{\boldsymbol{f}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{w}}=\bar{\boldsymbol{b}}*\tilde{\boldsymbol{g}}$。

步骤 4　令 $\boldsymbol{u}$ 表示 $\bar{\boldsymbol{u}}$ 的前 $n+1$ 个元素组成的向量，$\boldsymbol{v}$ 和 $\boldsymbol{w}$ 分别表示 $\bar{\boldsymbol{v}}$ 和 $\bar{\boldsymbol{w}}$ 的前 n 个元素组成的向量；定义

$$\tilde{\boldsymbol{v}}^{\mathrm{T}}=[0,\cdots,0,v_0,\cdots,v_{n-1}] \tag{3.3.16}$$

$$\tilde{\boldsymbol{w}}^{\mathrm{T}}=[0,\cdots,0,w_0,\cdots,w_{n-1}] \tag{3.3.17}$$

步骤 5　计算循环相关 $\bar{\boldsymbol{\xi}}=\tilde{\boldsymbol{g}}*\tilde{\boldsymbol{v}},\bar{\boldsymbol{\eta}}=\tilde{\boldsymbol{f}}*\tilde{\boldsymbol{w}}$，并定义

$$\hat{\boldsymbol{\xi}}=[\bar{\xi}_n,\bar{\xi}_{n-1},\cdots,\bar{\xi}_0] \tag{3.3.18}$$

$$\hat{\boldsymbol{\eta}}=[\bar{\eta}_n,\bar{\eta}_{n-1},\cdots,\bar{\eta}_0] \tag{3.3.19}$$

步骤 6　计算 $\boldsymbol{Px}=\boldsymbol{b}$ 的解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{u}+(\hat{\boldsymbol{\xi}}-\hat{\boldsymbol{\eta}})\bar{f}_0$。

除了镶嵌方法外，也可以利用广义 Schur 算法求解 Toeplitz 线性方程组，这种算法的计算复杂度与 Kumar 算法一样，也是 $O(n\log_2 n)$。具体算法可参考文献 [16]。

Kumar 算法已被推广用于 Toeplitz - 块 Toeplitz 线性方程组的快速求解 [108]。

3.4 Toeplitz 矩阵的快速余弦变换

N 阶离散余弦变换可以用一个 $N\times N$ 矩阵 $\boldsymbol{T}$ 表示，其中，$\boldsymbol{T}=[t_{m,l}]_{m,l=0}^{N-1}$ 的元素定义为

$$t_{m,l}=\tau_m\cos\left[\frac{\pi}{2N}m(2l+1)\right],\qquad m,l=0,1,\cdots,N-1 \tag{3.4.1}$$

且

$$\tau_m=\begin{cases}\sqrt{1/N}, & m=0\\ \sqrt{2/N}, & m=1,2,\cdots,N-1\end{cases} \tag{3.4.2}$$

根据上述定义，显然 $\boldsymbol{T}^{-1}=\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}$，即 $\boldsymbol{T}$ 是正交矩阵。因此，对于任意矩阵 $\boldsymbol{A}$，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{TAT}^{\mathrm{T}}$ 具有相同的特征值。

考查一 $N\times N$ 实 Toeplitz 矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}a_0 & a_1 & \cdots & a_{N-1}\\ a_{-1} & a_0 & \cdots & a_{N-2}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{-N+1} & a_{-N+2} & \cdots & a_0\end{bmatrix}=[a_{l,k}]_{l,k=0}^{N-1}=[a_{k-l}]_{l,k=0}^{N-1} \tag{3.4.3}$$

对其作离散余弦变换 $\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{TAT}^{\mathrm{T}}$。令 $\hat{\boldsymbol{A}} = [\hat{a}_{m,n}]$，$c_{m,n} = \cos\left[\frac{\pi}{2N}m(2n+1)\right]$，立即有

$$\hat{a}_{m,n} = \tau_m \left(\sum_{k=0}^{N-1} \sum_{l=0}^{N-1} c_{m,l} a_{l,k} c_{n,k} \right) \tau_n \tag{3.4.4}$$

建立离散余弦变换快速算法的关键是利用离散 Fourier 变换表示离散余弦变换。为此，引入中间变量

$$x_{m,k} = \sum_{l=0}^{N-1} w^{m(2l+1)} a_{l,k} \tag{3.4.5}$$

利用 $w = \exp\left(-\mathrm{j}\,\frac{\pi}{2N}\right)$，并注意到 $\boldsymbol{A}$ 是实矩阵，则有

$$\hat{a}_{m,n} = \tau_m \tau_n \left(\sum_{k=0}^{N-1} \mathrm{Re}[x_{m,n}] c_{n,k} \right) \tag{3.4.6}$$

其中，Re [·] 表示取复数的实部。再引入变量

$$y_{m,n} = \sum_{k=0}^{N-1} x_{m,k} w^{2nk} \tag{3.4.7}$$

由于

$$\hat{a}_{m,n} = \tau_m \tau_n \left(\sum_{k=0}^{N-1} \mathrm{Re}[x_{m,k}] \mathrm{Re}[w^{n(2k+1)}] \right) = \tau_m \tau_n \mathrm{Re}\left[w^n \sum_{k=0}^{N-1} \mathrm{Re}[x_{m,k}] w^{2nk} \right]$$

$$\begin{aligned} y_{m,n} + y^*_{m,-n} &= \sum_{k=0}^{N-1} [w^{2nk} x_{m,k} + (w^{-2nk})^* x^*_{m,k}] = \sum_{k=0}^{N-1} w^{2nk} (x_{m,k} + x^*_{m,k}) \\ &= 2 \sum_{k=0}^{N-1} \mathrm{Re}[x_{m,k}] w^{2nk} \end{aligned}$$

故有

$$\hat{a}_{m,n} = \tau_m \tau_n \mathrm{Re}\left[w^n \frac{y_{m,n} + y^*_{m,-n}}{2} \right] \tag{3.4.8}$$

式 (3.4.7) 和式 (3.4.8) 表明，Toeplitz 矩阵的离散余弦变换的计算取决于 $x_{m,n}$ 和 $y_{m,n}$ 的计算。考虑

$$\begin{aligned} & w^{2m} x_{m,k} + w^m [a_{k+1} - (-1)^m a_{1-N+k}] \\ &= w^{2m} \sum_{l=0}^{N-1} w^{m(2l+1)} a_{k-l} + w^m [a_{k+1} - (-1)^m a_{1-N+k}] \\ &= w^{2m} \sum_{l=1}^{N} w^{m(2l-1)} a_{k-l+1} + w^m [a_{k+1} - (-1)^m a_{1-N-k}] \\ &= \sum_{l=1}^{N} w^{m(2l+1)} a_{k-l+1} + w^m [a_{k+1} - (-1)^m a_{l-N+k}] \\ &= \sum_{l=0}^{N-1} w^{m(2l+1)} a_{k-l+1} + w^{m(2N+1)} a_{k-N+1} - w^m (-1)^m a_{1-N+k} \end{aligned} \tag{3.4.9}$$

利用

$$x_{m,k+1}=\sum_{l=0}^{N-1}w^{m(2l+1)}a_{k+1-l}$$

和 $w^{2N}=-1$，则得

$$\begin{aligned}x_{m,k+1}&=w^{2m}x_{m,k}+w^m[a_{k+1}-(-1)^m a_{1-N+k}]\\&\quad k=0,1,\cdots,N-2,\ m=0,1,\cdots,N-1\end{aligned}\tag{3.4.10}$$

定义

$$X_m(z)=\sum_{k=0}^{N-1}x_{m,k}z^k,\qquad y_{m,n}=X_m(w^{2n})\tag{3.4.11}$$

于是，式 (3.4.10) 左边的有限长度 z 变换为

$$\begin{aligned}\sum_{k=0}^{N-1}x_{m,k+1}z^k&=\sum_{k=-1}^{N-2}x_{m,k+1}z^k-x_{m,0}z^{-1}+x_{m,N}z^{N-1}\\&=\sum_{k=0}^{N-1}x_{m,k}z^{k-1}-x_{m,0}z^{-1}+x_{m,N}z^{N-1}\\&=z^{-1}X_m(z)-x_{m,0}z^{-1}+x_{m,N}z^{N-1}\end{aligned}\tag{3.4.12}$$

右边的 z 变换为

$$w^{2m}X_m(z)+w^m\sum_{k=0}^{N-1}z^k a_{k+1}-w^m(-1)^m\sum_{k=0}^{N-1}z^k a_{1-N+k}$$

故得

$$\begin{aligned}&X_m(z)(z^{-1}-w^{2m})\\&=x_{m,0}z^{-1}-x_{m,N}z^{N-1}+w^m\sum_{k=0}^{N-1}z^k a_{k+1}-w^m(-1)^m\sum_{k=0}^{N-1}z^k a_{1-N+k}\end{aligned}\tag{3.4.13}$$

需要指出的是，$x_{m,N}$ 由式 (3.4.10) 在 $k=N-1$ 时的递推关系定义。为此，需要计算 $k=N$ 时的 a_k 值，但它未包含在原来的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 内。任何一个值都可用作 a_N，因为它对 $y_{m,n}$ 值不会有任何影响。从数值角度看，取 $a_N=0$ 更好一些。

另外一方面，若引入

$$v_1(n)=\sum_{k=0}^{N-1}w^{2nk}a_{k+1},\qquad v_2(n)=\sum_{k=0}^{N-1}w^{2nk}a_{1-N+k}\tag{3.4.14}$$

则有

$$y_{m,n}(w^{-2n}-w^{2m})=x_{m,0}w^{-2n}-x_{m,N}w^{2n(N-1)}+w^m[v_1(n)-(-1)^m v_2(n)]\tag{3.4.15}$$

式 (3.4.15) 是构造快速离散余弦变换的关键结果。首先对 $n=-m; m=0,1,\cdots,N-1$ 计算式 (3.4.15)，得到

$$\begin{aligned}x_{m,N} &= w^{-2n(N-1)}\{x_{m,0}w^{-2n}+w^m[v_1(n)-(-1)^m v_2(n)]\}\\ &= w^{2m(N-1)}\{x_{m,0}w^{2m}+w^m[v_1(n)-(-1)^m v_2(n)]\}\end{aligned} \tag{3.4.16}$$

利用 $w^{2N}=-1$，则上式变作

$$x_{m,N}=(-1)^m x_{m,0}+w^{-m}((-1)^m v_1(n)-v_2(n)) \tag{3.4.17}$$

此式提供了计算 $x_{m,N}, m=0,1,\cdots,N-1$ 的公式。这些计算出来的值连同式 (3.4.14) 一起用于计算 $m\neq -n$ 的 $y_{m,n}$ 值，得到

$$y_{m,n}=\frac{1}{w^{-2n}-w^{2m}}\left\{x_{m,0}w^{-2n}-x_{m,N}w^{-2n}(-1)^n+w^m\left[v_1(n)-(-1)^m v_2(n)\right]\right\} \tag{3.4.18}$$

这一结果使得我们可以计算出 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的对角线以外的元素。当 $m=-n$ 时，我们得到不定式 0/0。为了计算 $y_{m,-m}$，展开式 (3.4.13) 得到

$$\begin{aligned}&X_m(z)\\ &=\left\{x_{m,0}z^{-1}-x_{m,N}z^{N-1}+w^m\left[\sum_{k=0}^{N-1}z^k a_{k+1}-(-1)^m\sum_{k=0}^{N-1}z^k a_{1-N+k}\right]\right\}(z^{-1}-w^{2m})^{-1}\end{aligned}$$

上式的分子和分母分别对 z 求导，并计算在 $z_0=w^{2n}=w^{-2m}$ 的值，得到

$$\begin{aligned}&X_m(z_0)\\ &=z_0^2\left\{x_{m,0}z_0^{-2}+(N-1)x_{m,N}z_0^{N-2}-w^m\left[\sum_{k=0}^{N-1}kz_0^{k-1}a_{k+1}-(-1)^m\sum_{k=0}^{N-1}kz_0^{k-1}a_{1-N+k}\right]\right\}\end{aligned} \tag{3.4.19}$$

即

$$X_m(z_0)=x_{m,0}+(N-1)x_{m,N}z_0^N-w^m z_0\left[\sum_{k=0}^{N-1}kz_0^k a_{k+1}-(-1)^m\sum_{k=0}^{N-1}kz_0^k a_{1-N+k}\right]$$

代入 $z_0=w^{2n}=w^{-2m}$，即给出计算 $y_{m,-m}$ 的公式：

$$y_{m,-m}=x_{m,0}+(N-1)(-1)^m x_{m,N}-w^{-m}[u_1(-m)-(-1)^m u_2(-m)] \tag{3.4.20}$$

其中

$$u_1(n)=\sum_{k=0}^{N-1}kw^{2nk}a_{k+1},\quad u_2(n)=\sum_{k=0}^{N-1}kw^{2nk}a_{1-N+k} \tag{3.4.21}$$

式 (3.4.20) 使得我们可以计算 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的对角线元素。综上，计算 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的完整算法如下 [340]。

算法 3.4.1 (Toeplitz 矩阵的快速离散余弦变换)

步骤 1 在式 (3.4.5) 中令 $k=0$，并计算 $x_{m,0}, m=0,1,\cdots,N-1$。(计算复杂度：一次 $2N$ 点 DFT)

步骤 2 利用式 (3.4.14) 计算 $v_1(n), v_2(n), n=-(N-1),\cdots,(N-1)$。(计算复杂度：两次 $2N$ 点 DFT)

步骤 3 利用式 (3.4.17) 计算 $x_{m,N}, m=0,1,\cdots,N-1$。(计算复杂度：$N$ 次乘法)

步骤 4 利用式 (3.4.21) 计算 $u_1(n), u_2(n), n=-(N-1),\cdots,(N-1)$。(计算复杂度：两次 $2N$ 点 DFT)

步骤 5 由式 (3.4.18) 和式 (3.4.20) 计算 $y_{m,n}$。(计算复杂度：对每个值只有若干次乘法)

步骤 6 利用式 (3.4.8) 计算 $\hat{a}_{mn}$。(计算复杂度：对每个值为若干次乘法)

计算 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值的通常做法是：利用变换方法 (如 Givens 旋转等) 将 $\boldsymbol{A}$ 的非对角线元素转换成零，即对 $\boldsymbol{A}$ 进行对角化。如前所述，由于 $\boldsymbol{T}$ 为正交矩阵，$\hat{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{TAT}^{\mathrm{T}}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的特征值，所以在求 $\boldsymbol{A}$ 的特征值时可以对 $\boldsymbol{A}$ 的离散余弦变换 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 实施对角化，而且这比直接对角化 $\boldsymbol{A}$ 更好，因为大多数的化简工作已经用离散余弦变换做过了。因此，离散余弦变换可以用作一快速特征值预置条件器。况且，在某些情况下，变换后的矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 已是 $\boldsymbol{A}$ 的足够精确的特征值估计 [188]。

一些例子表明 [340]，Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的快速余弦变换 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 还可用作 $\boldsymbol{A}$ 的逼近，因为 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的主要分量集中在一个小得多的矩阵分块里，它相当于 $\boldsymbol{A}$ 的稳定部分。从秩的判断出发，$\hat{\boldsymbol{A}}$ 的秩可明显看出，而 $\boldsymbol{A}$ 的秩则不容易看出。注意，由于 $\boldsymbol{A}$ 和 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 具有相同的特征值，所以二者的秩相同。应当指出，求解 Toeplitz 矩阵方程组还有一类共轭梯度法，对此类算法有兴趣的读者可参考综述 [77]。另外，有关 Toeplitz 矩阵的特征值分解，将留待在第 8 章 (特征分析) 中讨论。

本章小结

本章围绕 Toeplitz 矩阵，先讨论了它的重要性质 (尤其是半正定性)，然后集中介绍了求解 Toeplitz 矩阵方程组的几种方法:

(1) Levinson 递推算法;

(2) Hermitian Levinson 递推算法;

(3) 多信道 Levinson 递推算法;

(4) Kumar 快速算法。

最后，本章还介绍了 Toeplitz 矩阵的快速余弦变换。

第 4 章　矩阵的变换与分解

在求解线性代数方程、进行模型参数估计等许多典型的问题中，常常需要将矩阵分解为二个或三个特殊矩阵的乘积或和。

在有关线性代数或矩阵理论与计算的现有专著中，矩阵的各种分解是分开论述的，有时难免给人以矩阵分解似乎零乱、很难归类的感觉。本章将尝试对矩阵的分解进行分类，并按类介绍各种矩阵分解。

矩阵分解的目的是通过矩阵的线性变换来实现的，这种变换能够将原矩阵某些特定位置上的元素变换为零。由于反射与旋转是实现线性变换的两种基本手段，所以本章先从反射与旋转入手，然后再展开对矩阵分解的集中讨论。

4.1　Householder 变换

在很多工程应用中，希望对某个矩阵进行变换，使之成为某种特殊形式的矩阵。例如，使之变成上三角矩阵或者下三角矩阵。以 4×4 矩阵为例，希望变换结果为

$$\boldsymbol{P}\begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times \end{bmatrix}$$

或者

$$\begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \end{bmatrix}\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} \times & 0 & 0 & 0 \\ \times & \times & 0 & 0 \\ \times & \times & \times & 0 \\ \times & \times & \times & \times \end{bmatrix}$$

矩阵 $\boldsymbol{P}$ 称为旋转变换矩阵，简称旋转矩阵。

一般情况下，要求旋转矩阵 $\boldsymbol{P}$ 满足条件

$$\boldsymbol{P}\boldsymbol{J}\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{J} \tag{4.1.1}$$

其中

$$\boldsymbol{J} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

或者

$$J = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

为符号矩阵。

满足式 (4.1.1) 的复矩阵 $\boldsymbol{P}$ 称为 J 酉矩阵 [404]。它是 J 正交矩阵在复矩阵情况下的推广。显然，若 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{I}$，则 J 酉矩阵退化为酉矩阵 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{I}$，亦即酉矩阵是 $\boldsymbol{J}$ 酉矩阵的特例。

完成非零矩阵的上述特殊变换，涉及到将该矩阵的列向量或者行向量进行变换，使该向量的某些元素变成零。通常，还希望变换后的向量与原向量具有相同的范数或长度。Householder 变换和 Givens 旋转是实现这种矩阵旋转变换的典型方法。

4.1.1 Householder 变换与 Householder 矩阵

考虑将一向量 $\boldsymbol{x}$ 分解为两个正交的分向量。如图 4.1.1 所示，假定除了向量 $\boldsymbol{x}$ 外，还有另一已知向量 $\boldsymbol{v}$。现在，先将 $\boldsymbol{x}$ 投影到 $\boldsymbol{v}$，产生投影 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}$。然后将 $\boldsymbol{x}$ 投影到与 $\boldsymbol{v}$ 垂直的超平面 $\boldsymbol{v}^{\perp}$ 上，产生另外一个投影 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x}$。投影 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x}$ 称为向量 $\boldsymbol{x}$ 到向量 $\boldsymbol{v}$ 的正交投影。于是，这两个投影就构成了以 $\boldsymbol{x}$ 为对角线的矩形的两个边。

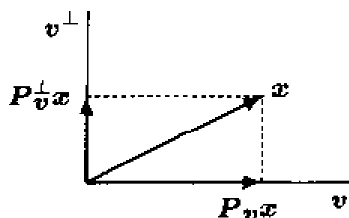


图 4.1.1 向量的正交分解

根据向量加法的规则，$\boldsymbol{x}$ 可以表示为这两个投影的向量之和 (合成向量)，即

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x} \tag{4.1.2}$$

向量 $\boldsymbol{x}$ 的这一分解形式称为正交分解。

在上述二维的例子中，$\boldsymbol{v}^{\perp}$ 是一直线，而 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x}$ 为一向量。在更高维的情况下，$\boldsymbol{v}^{\perp}$ 变成一多维目标 (超平面)，而 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x}$ 仍然为包含在 $\boldsymbol{v}^{\perp}$ 内部的一向量。

正交分解式 (4.1.2) 中的矩阵

$$\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}=\boldsymbol{v}\langle\boldsymbol{v},\boldsymbol{v}\rangle^{-1}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}} \tag{4.1.3}$$

和

$$\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{v}\langle\boldsymbol{v},\boldsymbol{v}\rangle^{-1}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}} \tag{4.1.4}$$

分别称为向量 $\boldsymbol{v}$ 的投影矩阵和正交投影矩阵。

如果我们不是像图 4.1.1 那样构造两个投影 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x}$ 之和，而是构造二者之差，就会得到一个新向量 $\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}$，如图 4.1.2 所示。图中，$\boldsymbol{x}=[2,4],\boldsymbol{v}=[2,1]$，因此 $-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}=\left[-\frac{18}{5},-\frac{8}{5}\right]$，$\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x}=\left[-\frac{6}{5},\frac{12}{5}\right]$，于是，$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}=\left[-\frac{22}{5},\frac{4}{5}\right]$。

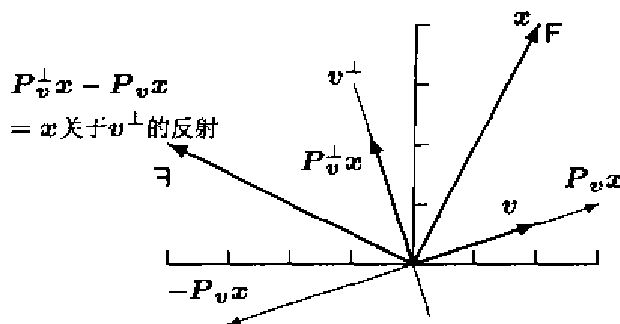


图 4.1.2 向量的 Householder 变换

矩阵

$$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}=\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}} \tag{4.1.5}$$

称为向量 $\boldsymbol{v}$ 的 Householder (变换) 矩阵，而向量

$$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x} \tag{4.1.6}$$

叫做向量 $\boldsymbol{x}$ 相对于向量 $\boldsymbol{v}$ 的 Householder 变换。

Householder 变换也称初等反射 (elementary reflection)，是 Turnbull 与 Aitken [453] 于 1932 年作为一种规范矩阵提出来的。这种变换成为数值线性代数的一种标准工具归功于 Householder 于 1958 年发表的一篇关于非对称矩阵的对角化论文 [229]。

将投影矩阵的定义式 (4.1.3) 和正交投影矩阵的定义式 (4.1.4) 代入式 (4.1.5)，即可得到 Householder 矩阵和 Householder 变换的具体表达式分别为

$$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}/(\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v}) \tag{4.1.7}$$

和

$$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}-2\boldsymbol{v}\langle\boldsymbol{v},\boldsymbol{x}/(\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v}) \tag{4.1.8}$$

由于 Householder 矩阵 $\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}$ 是由向量 $\boldsymbol{v}$ 生成的，所以向量 $\boldsymbol{v}$ 习惯称为 Householder 向量。容易验证：

$$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}^{\mathrm{H}}=(\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}=\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}$$

并且

$$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}=(\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}-\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}})=\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}+\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}=\boldsymbol{I}$$

和 $\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{I}$。就是说，Householder 矩阵具有以下重要性质：

(1) Householder 矩阵是复共轭对称即 Hermitian 矩阵。

(2) Householder 矩阵为酉矩阵。

Householder 变换的几何意义如下。如图 4.1.2 所示，$\boldsymbol{H}_v\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 的差别仅表现在它们在向量 $\boldsymbol{v}$ 上的投影的方向不同而已。我们还可看到，$\boldsymbol{H}_v\boldsymbol{x}$ 是向量 $\boldsymbol{x}$ 关于与 $\boldsymbol{v}$ 垂直的超平面 $\boldsymbol{v}^\perp$ 的一个反射 (镜像)。因此，Householder 变换又叫镜像变换。

4.1.2 Householder 变换的保范性

值得强调的是，Householder 变换是对某个向量进行反射的保范数算子或保长度算子。为了从几何角度看出这一点，不妨把图 4.1.2 中的向量 $\boldsymbol{x}$ 想像成从原点指向到标有 “F” 点的一有向线段。如果将此向量相对于超平面 $\boldsymbol{v}^\perp$ 作反射，那么目标 “F” 就有一个镜像，即反 “F”。

若两个向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 经过同一线性变换 T 后，它们的线性变换向量 $T\boldsymbol{x},T\boldsymbol{y}$ 的内积 $\langle T\boldsymbol{x},T\boldsymbol{y}\rangle$ 与原来两个向量的内积 $\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$ 相等，则称线性变换 T 具有保范 (数) 性。更严格地，Householder 变换的保范性可用数学语言表述如下。

定理 4.1.1 (Householder 变换的保范性) 给定任意三个向量 $\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{v}$，则关系式

$$\langle \boldsymbol{H}_v\boldsymbol{x},\boldsymbol{H}_v\boldsymbol{y}\rangle = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle \tag{4.1.9}$$

总是成立。

证明 由式 (4.1.6) 易知

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{H}_v\boldsymbol{x},\boldsymbol{H}_v\boldsymbol{y}\rangle &= \langle \boldsymbol{P}_v^\perp\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}_v\boldsymbol{x},\boldsymbol{P}_v^\perp\boldsymbol{y}-\boldsymbol{P}_v\boldsymbol{y}\rangle\\ &= (\boldsymbol{P}_v^\perp\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}_v\boldsymbol{x})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{P}_v^\perp\boldsymbol{y}-\boldsymbol{P}_v\boldsymbol{y})\end{aligned}$$

利用投影矩阵和正交投影矩阵的等幂性、复共轭对称性和正交性，上式可简化为

$$\langle \boldsymbol{H}_v\boldsymbol{x},\boldsymbol{H}_v\boldsymbol{y}\rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_v^\perp\boldsymbol{y}+\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_v\boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_v)\boldsymbol{y}+\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_v\boldsymbol{y} = \langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle$$

这即是式 (4.1.9)。 ■

考查随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\boldsymbol{y}(\xi)$，令它们都具有零均值向量。于是，这两个随机向量的互协方差函数和互相关函数相等，即

$$C_{xy}(\tau) = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\xi)\boldsymbol{y}(\xi-\tau)\} = \langle \boldsymbol{x}(\xi),\boldsymbol{y}(\xi-\tau)\rangle$$

现在，利用 Householder 变换，将随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 分别变成新随机向量 $\tilde{\boldsymbol{x}}(\xi) = \boldsymbol{H}_v\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\tilde{\boldsymbol{y}}(\xi) = \boldsymbol{H}_v\boldsymbol{y}(\xi)$。由定理 4.1.1 知

$$\begin{aligned}R_{\tilde{x}\tilde{y}}(\tau) &= \mathrm{E}\{\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{H}}(\xi)\tilde{\boldsymbol{y}}(\xi-\tau)\} = \langle \boldsymbol{H}_v\boldsymbol{x}(\xi),\boldsymbol{H}_v\boldsymbol{y}(\xi-\tau)\rangle\\ &= \langle \boldsymbol{x}(\xi),\boldsymbol{y}(\xi-\tau)\rangle = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\xi)\boldsymbol{y}(\xi-\tau)\}\\ &= R_{xy}(\tau)\end{aligned}$$

由于具有零均值向量的随机向量经过线性变换后，仍然具有零均值向量，所以上式意味着 $C_{\tilde{x}\tilde{y}}(\tau) = C_{xy}(\tau)$，即经过 Householder 变换得到的新随机向量 $\tilde{\boldsymbol{x}}(\xi) = \boldsymbol{H}_v\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\tilde{\boldsymbol{y}}(\xi) = \boldsymbol{H}_v\boldsymbol{y}(\xi)$ 的协方差函数与原随机向量 $\boldsymbol{x}(\xi)$ 和 $\boldsymbol{y}(\xi)$ 之间的协方差相等。

综上所述，Householder 变换不仅适用于常数向量，而且也适用于随机向量，因为它能够保持随机向量的协方差 (即二阶统计量) 不变。

Householder 变换的范数 (或者协方差) 不变性是几乎所有 Householder 变换应用的关键。

令 $\boldsymbol{\Phi} = \mathrm{diag}(\phi_1, \phi_2, \cdots, \phi_n)$，则加权形式的向量内积 (范数) 为

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle_{\boldsymbol{\Phi}} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Phi} \boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{n} x_i \phi_i y_i \tag{4.1.10}$$

最简单的加权为均匀加权，即加权系数取作 $\phi_i \equiv 1$。在信号处理和模式识别中，更多地采用以下的非均匀加权。

1. 逐点指数加权

内积加权函数取

$$\phi_i = \lambda^{n-i} \tag{4.1.11}$$

其中，$0 < \lambda < 1$。显然，在现时刻 n，$\lambda^0 = 1$，即现时刻的数据 x_n 以权系数 1 起作用，而最早的数据 x_1 则被一个最小的数 λ^{n-1} 加权。因此，λ 常被称为遗忘因子。

2. 分块指数加权

此时，加权系数取

$$\phi_i = \begin{cases} \lambda, & i \leqslant n_0 \\ 1, & i > n_0 \end{cases} \tag{4.1.12}$$

就是说，数据现在是以“块”的形式被遗忘，而不是逐点被遗忘的。当要求针对几个数据而不是单个数据进行更新时，常采用这种加权形式。

3. 双曲线加权

假定需要从协方差矩阵中精确地删去旧的数据，而不是像式 (4.1.11) 和式 (4.1.12) 那样只是衰减旧数据。此时，如果采用加权系数

$$\phi_i = \begin{cases} 0, & i \leqslant n_0 \\ 1, & i > n_0 \end{cases} \tag{4.1.13}$$

我们就把数据块 $x_{n_0+1}, x_{n_0+2}, \cdots, x_n$ 拷贝到了向量 $\boldsymbol{x}$ 的最后 $n - n_0$ 个元素中，并从协方差矩阵中删掉了 $x_1, x_2, \cdots, x_{n_0}$。针对所有的 x_i，可以只扔掉那些不想要的数据。当 $x_1, x_2, \cdots, x_{n_0}$ 欲被它们的稀疏对应部分取代时，式 (4.1.13) 的权系数形式是有用的。

有必要指出，在现代数学物理的相对论中，就用到四维空间的 Householder 变换的双曲线形式，此时 $n_0 = n - 1$。不过，这一变换被物理学家称为 Lorentz 变换 [357]。

图 4.1.3 画出了使用不同加权系数的 Householder 反射轨迹。如图所示，对于均匀加权，Householder 反射轨迹为圆；对于指数加权，反射轨迹为椭圆；而双曲线加权的反射轨迹为双曲线。

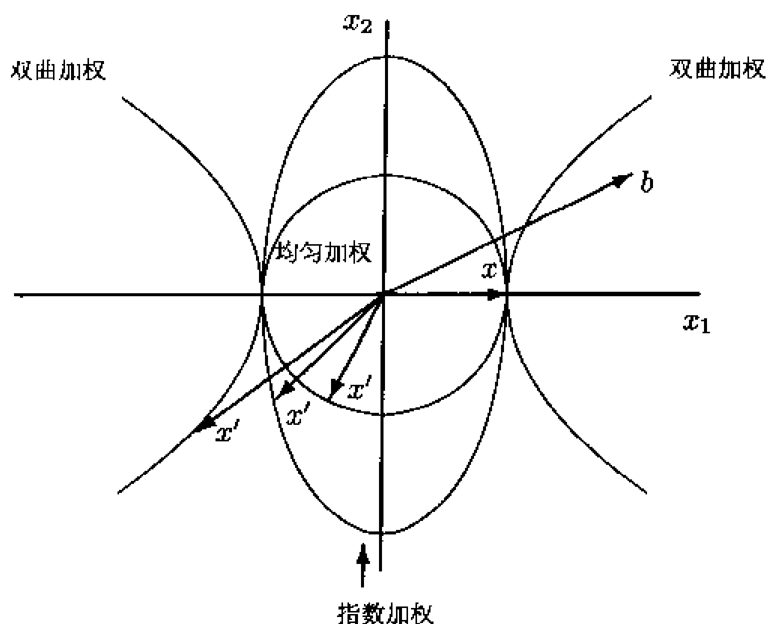


图 4.1.3 使用不同加权系数时向量 $\boldsymbol{x}$ 的 Householder 反射轨迹

4.1.3 Householder 变换算法

Householder 变换最典型的应用是在数值算法中构造正交基，使得数值问题变成一种容易求解的形式。从计算观点看，这类变换的作用是使向量或者矩阵中被选择出来的一些元素变成零。

Householder 矩阵既能使一向量的某些元素变为零，又能保持该向量的长度或范数不变。作为一个典型的例子，考虑利用 Householder 变换将一非零向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^{\mathrm{T}}$ 变成基本向量 (也称标准向量) $\boldsymbol{e}_1 = [1, 0, \cdots, 0]^{\mathrm{T}}$ 的某个常数倍。为此，令实 Householder 矩阵

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}/(\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}) \tag{4.1.14}$$

由前面的分析知，Householder 矩阵 $\boldsymbol{H}$ 是对称的和正交的。

构造 Householder 向量

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{x} + \alpha\boldsymbol{e}_1 \tag{4.1.15}$$

从而得到

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + \alpha x_1 \tag{4.1.16}$$

和

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} + 2\alpha x_1 + \alpha^2 \tag{4.1.17}$$

式中，x_1 是向量 $\boldsymbol{x}$ 的第 1 个元素。

将式 (4.1.16) 和式 (4.1.17) 代入式 (4.1.14)，则有

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x} = \left(1 - 2\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + \alpha x_1}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} + 2\alpha x_1 + \alpha^2}\right)\boldsymbol{x} - 2\alpha\frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}\boldsymbol{e}_1$$

为了使 Householder 变换结果与向量 $\boldsymbol{x}$ 无关，令

$$2\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+\alpha x_1}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+2\alpha x_1+\alpha^2}=1$$

解之，得 $\alpha=\pm\|\boldsymbol{x}\|_2$，其中，$\|\boldsymbol{x}\|_2^2=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$。

将 $\alpha=\pm\|\boldsymbol{x}\|_2$ 代入式 (4.1.15)，得 Householder 向量

$$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{x}\pm\|\boldsymbol{x}\|_2\boldsymbol{e}_1$$

故

$$\boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\left(\boldsymbol{I}-2\frac{\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}\right)\boldsymbol{x}=\mp\|\boldsymbol{x}\|_2\boldsymbol{e}_1$$

因此，为了使非零向量 $\boldsymbol{x}$ 变换成基本向量 $\boldsymbol{e}_1$ 的某倍数，可以利用

$$\boldsymbol{v}=\boldsymbol{x}+\mathrm{sgn}(x_1)\|\boldsymbol{x}\|_2\boldsymbol{e}_1 \tag{4.1.18}$$

计算 Householder 向量 $\boldsymbol{v}$。式中，$\mathrm{sgn}(x_1)$ 为变量 x_1 的符号函数。

考虑使用 Householder 变换将 $\boldsymbol{x}=[3,4]$ 变换为稀疏数据的向量 $-\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_1=-[5,0]$。此时，$\boldsymbol{v}=[8,4],\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}=[4,2],\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x}=[-1,2]$，$\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}=-[5,0]$，其结果如图 4.1.4 所示。

图4.1.4 产生稀疏数据的Householder变换

下面讨论更一般的情况：希望将 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 变换为一个新的 (稀疏) 向量 $\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_k$，其中，$\boldsymbol{e}_k$ 仅有第 k 个元素为 1，而其他元素皆为 0。令实现这一变换的 Householder 矩阵为 $\boldsymbol{H}_k$，则有

$$\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{x}=\beta\boldsymbol{e}_k,\quad |\beta|=\|\boldsymbol{x}\|,\quad \boldsymbol{x}\in C^{n\times 1} \tag{4.1.19}$$

变换矩阵具有表达式

$$\boldsymbol{H}_k=\boldsymbol{I}-\frac{1}{\bar{\beta}(\beta-x_k)}(\boldsymbol{x}-\beta\boldsymbol{e}_k)(\boldsymbol{x}-\beta\boldsymbol{e}_k)^{\mathrm{H}} \tag{4.1.20}$$

式中，$\bar{\beta}$ 是一个中间变量，定义为

$$\bar{\beta}x_k=\pm|x_k|\|\boldsymbol{x}\| \tag{4.1.21}$$

考虑到式 (4.1.20) 的稳定性，一般的做法是在上式中取负号。虽然早在 1971 年，Parlett[354] 通过分析就曾经指出过，若适当使用 $(\beta - x_k)$ 的公式，则其他的选择并非一定不稳定，但是由于缺乏具体的算法，这一工作并未引起人们的重视。直到 2000 年，Dubrulle[137] 才提出了具体的实现算法。下面介绍 Dubrulle 的这一工作。

Householder 矩阵取

$$\boldsymbol{H}_k = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}, \qquad \boldsymbol{u} = \frac{\boldsymbol{x} - \beta \boldsymbol{e}_k}{\sqrt{\bar{\beta}(\beta - x_k)}} \tag{4.1.22}$$

式中，$\boldsymbol{u}$ 是一个长度为 2 的向量，即 $\|\boldsymbol{u}\| = \sqrt{2}$，并且

$$\bar{\beta} = -|x_k|\|\boldsymbol{x}\| \tag{4.1.23}$$

由式 (4.1.21) 知 $\bar{\beta}x_k$ 必须是实数，故取

$$\beta = \pm\frac{x_k}{|x_k|}\|\boldsymbol{x}\|, \qquad x_k \neq 0 \tag{4.1.24}$$

当 $x_k = 0$ 时，直接取 $\beta = \|\boldsymbol{x}\|$。由上式引出了两种类型的 Householder 变换。

1. 1 型 Householder 变换

取 $\beta = -\dfrac{x_k}{|x_k|}\|\boldsymbol{x}\|$，与之对应的 Householder 矩阵为

$$\boldsymbol{H}_k^{(1)} = \boldsymbol{I} - \frac{1}{\|\boldsymbol{x}\|(\|\boldsymbol{x}\| + |x_k|)}(\boldsymbol{x} - \beta\boldsymbol{e}_k)(\boldsymbol{x} - \beta\boldsymbol{e}_k)^{\mathrm{H}} \tag{4.1.25}$$

这是通常采用的一种类型。Householder 向量 $\boldsymbol{u}$ 直接由式 (4.1.22) 计算，或者通过计算其元素得到，即

$$u_k^{(1)} = \frac{x_k}{|x_k|}\left(1 + \frac{|x_k|}{\|\boldsymbol{x}\|}\right)^{1/2} \tag{4.1.26}$$

$$u_i^{(1)} = \frac{x_i}{|x_k|}\left(1 + \frac{|x_k|}{\|\boldsymbol{x}\|}\right)^{-1/2}, \quad i \neq k \tag{4.1.27}$$

2. 2 型 Householder 变换

取 $\beta = \dfrac{x_k}{|x_k|}\|\boldsymbol{x}\|$，Householder 矩阵为

$$\boldsymbol{H}_k^{(2)} = \boldsymbol{I} - \frac{1 + \dfrac{|x_k|}{\|\boldsymbol{x}\|}}{\|\boldsymbol{x} - x_k\boldsymbol{e}_k\|^2}(\boldsymbol{x} - \beta\boldsymbol{e}_k)(\boldsymbol{x} - \beta\boldsymbol{e}_k)^{\mathrm{H}} \tag{4.1.28}$$

此时，Householder 向量 $\boldsymbol{u}$ 由式 (4.1.22) 计算，或者其元素直接取为

$$u_k^{(2)} = -\frac{x_k}{|x_k|}\frac{\|\boldsymbol{x} - x_k\boldsymbol{e}_k\|}{\|\boldsymbol{x}\|}\left(1 + \frac{|x_k|}{\|\boldsymbol{x}\|}\right)^{-1/2} \tag{4.1.29}$$

$$u_i^{(2)} = \frac{x_i}{\|\boldsymbol{x} - x_k\boldsymbol{e}_k\|}\left(1 + \frac{|x_k|}{\|\boldsymbol{x}\|}\right)^{1/2}, \quad i \neq k \tag{4.1.30}$$

可以看出，虽然 2 型 Householder 变换需要稍多的算术运算，但在比较大的计算中，这一增加的运算量可以忽略不计。一个被激励的向量 $\boldsymbol{x}$ 经过 Householder 变换后，变成新向量

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - (\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})\boldsymbol{u} \tag{4.1.31}$$

当然希望 $\boldsymbol{y}$ 应该保留原激励向量 $\boldsymbol{x}$ 所携带的信息。

通过选择

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{x} + \|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_k \tag{4.1.32}$$

即可实现给出该稀疏数据的 Householder 变换。其证明如下：由于 $\boldsymbol{v}$ 是两个相同长度的向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_k$ 的合成向量，因此，该合成向量是菱形即等边平行四边形的一条对角线，而另一条对角线连接 $\boldsymbol{x}$ 的端点和 $\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_k$ 的端点。由于菱形的对角线总是相互垂直的，故它们在中点相交，即有

$$\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{v}/2 \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{v}}^{\perp}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x} - \boldsymbol{v}/2 \quad \rightarrow \quad \boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x} = -\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_k$$

这就证明了：向量 $\boldsymbol{x}$ 关于向量 $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{x} + \|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_k$ (菱形对角线) 的反射 $\|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_k$ 就是 $\boldsymbol{x}$ 关于 $\boldsymbol{v}$ 的 Householder 变换 $\boldsymbol{H}_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{x}$。

Householder 变换对于形成协方差不变的稀疏数据是非常有用的。

总结以上讨论，若选择

$$\boldsymbol{H}_k = \boldsymbol{I} - 2\frac{\boldsymbol{v}_k\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_k} \tag{4.1.33}$$

式中，Householder 变换向量 $\boldsymbol{v}_k$ 具有形式

$$\boldsymbol{v}_k = [0, \cdots, 0, 1, v_k(k+1), \cdots, v_k(n)]^{\mathrm{T}} \tag{4.1.34}$$

则 $\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{x} = \|\boldsymbol{x}\|\boldsymbol{e}_k$。

如果对矩阵 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n]$ 的 $r(\leqslant n)$ 个列向量分别使用 Householder 变换，得到变换结果 $\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{a}_k = \|\boldsymbol{a}_k\|\boldsymbol{e}_k$，则最后的变换结果为

$$\boldsymbol{HA} = \boldsymbol{H}_r\boldsymbol{H}_{r-1}\cdots\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A} \tag{4.1.35}$$

在此变换过程中，一般并不关心总的 Householder 矩阵 $\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}_r\boldsymbol{H}_{r-1}\cdots\boldsymbol{H}_1$，而只是对 $\boldsymbol{H}$ 作用于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最后结果 $\boldsymbol{HA}$ 感兴趣。不妨令 $\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{A}_{k-1}$，则

$$\boldsymbol{A}_k = \boldsymbol{H}_k\boldsymbol{A}_{k-1} = \left(\boldsymbol{I} - 2\frac{\boldsymbol{v}_k\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{T}}}{\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_k}\right)\boldsymbol{A}_{k-1} = \boldsymbol{A}_{k-1}\boldsymbol{v}_k\boldsymbol{w}_k^{\mathrm{T}} \tag{4.1.36}$$

$$\boldsymbol{w}_k = \beta\boldsymbol{A}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_k, \qquad \beta = -2/(\boldsymbol{v}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}_k) \tag{4.1.37}$$

于是，最后的 Householder 变换结果即是 $\boldsymbol{HA} = \boldsymbol{H}_r\boldsymbol{A}_{r-1}$。

在 4.7 节，我们将具体介绍如何利用 Householder 变换实现矩阵的 QR 分解及其在自适应信号处理中的应用。

4.2 Givens 旋转

如 4.1 节所述，利用 Householder 向量 $\boldsymbol{v}$ 对向量 $\boldsymbol{x}$ 所作的 Householder 变换结果是原向量 $\boldsymbol{x}$ 关于超平面 $\boldsymbol{v}^{\perp}$ 的反射镜像，并且保持了原向量的长度不变。现在，我们来看可以保持向量长度不变的另外两种变换算子。

4.2.1 反射与旋转

为方便计，考查 2×1 实向量 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2]^{\mathrm{T}}$，其几何表示如图 4.2.1 所示。

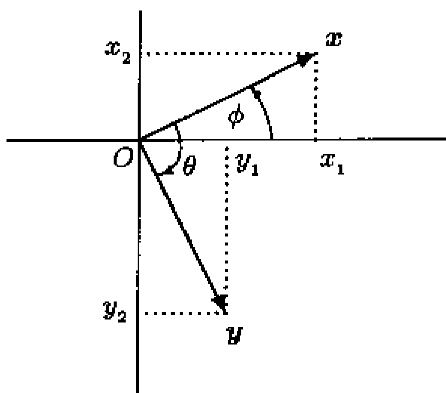


图 4.2.1 反射

令向量 $\boldsymbol{x}$ 的长度为 r，幅角为 ϕ，即有

$$r=\sqrt{x_1^2+x_2^2},\quad x_1=r\cos\phi,\quad x_2=r\sin\phi \tag{4.2.1}$$

现在将向量 $\boldsymbol{x}$ 顺时针旋转 θ 角 (即逆时针旋转 $-\theta$)，得到另外一个向量 $\boldsymbol{y}=[y_1,y_2]^{\mathrm{T}}$。显然，向量 $\boldsymbol{y}$ 和向量 $\boldsymbol{x}$ 具有相同的长度 r，即 $r=\sqrt{y_1^2+y_2^2}=\sqrt{x_1^2+x_2^2}$，而其幅角为 $\phi-\theta$。于是，利用式 (4.2.1) 得

$$y_1=r\cos(\theta-\phi)=r\cos\phi\cos\theta+r\sin\phi\sin\theta=x_1\cos\theta+x_2\sin\theta$$

$$y_2=r\sin(\theta-\phi)=r\sin\theta\cos\phi-r\cos\theta\sin\phi=x_1\sin\theta-x_2\cos\theta$$

或写作矩阵形式

$$\begin{bmatrix}y_1\\y_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ \sin\theta & -\cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}\overset{\mathrm{def}}{=}\boldsymbol{Q}\begin{bmatrix}x_1\\x_2\end{bmatrix}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} \tag{4.2.2}$$

定义正弦参数 $s=\sin\theta$ 和余弦参数 $c=\cos\theta$，则矩阵

$$\boldsymbol{Q}=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ \sin\theta & -\cos\theta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}c & s\\ s & -c\end{bmatrix} \tag{4.2.3}$$

容易验证，$\boldsymbol{Q}$ 既是对称矩阵，又是正交矩阵。矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 习惯称为反射矩阵，有时也称为反射矩阵。

显然，若选择 $\theta=\phi$，则 $y_1=r\cos(\phi-\theta)=r$ 和 $y_2=-r\sin(\phi-\theta)=0$，即通过反射矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 将向量 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2]^{\mathrm{T}}$ 变换成了向量 $\boldsymbol{y}=[\sqrt{x_1^2+x_2^2},0]^{\mathrm{T}}$，仍然达到了使向量 $\boldsymbol{x}$ 的某个元素变为 0，并且向量长度保持不变的变换目的。易知，此时

$$c=\frac{x_1}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}}=\frac{1}{\sqrt{1+\rho^2}} \tag{4.2.4}$$

$$s=\frac{x_2}{\sqrt{x_1^2+x_2^2}}=\frac{\rho}{\sqrt{1+\rho^2}} \tag{4.2.5}$$

式中，$\rho=x_2/x_1$，且 $x_1\neq 0$。

由于反射矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 为对称矩阵，故

$$(\boldsymbol{Qx})^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q} \tag{4.2.6}$$

这表明，若

$$\begin{bmatrix} c & s\\ s & -c\end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sqrt{x_1^2+x_2^2}\\ 0\end{bmatrix} \tag{4.2.7}$$

则有

$$[x_1,x_2]\begin{bmatrix} c & s\\ s & -c\end{bmatrix}=\left[\sqrt{x_1^2+x_2^2},0\right] \tag{4.2.8}$$

如果我们不是将向量 $\boldsymbol{x}$ 顺时针旋转 θ 角，而是逆时针旋转 θ 角，得到向量 $\boldsymbol{y}$，则其长度仍然为 r，但幅角变为 $\phi+\theta$，参见图 4.2.2。此时，有

$$y_1=r\cos(\phi+\theta)=r\cos\phi\cos\theta-r\sin\phi\sin\theta=x_1\cos\theta-x_2\sin\theta$$

$$y_2=r\sin(\phi+\theta)=r\sin\phi\cos\theta+r\cos\phi\sin\theta=x_1\sin\theta+x_2\cos\theta$$

或写作矩阵形式

$$\begin{bmatrix} y_1\\ y_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix} x_1\\ x_2\end{bmatrix}\stackrel{\text{def}}{=}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix} x_1\\ x_2\end{bmatrix}=\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \tag{4.2.9}$$

式中

$$\boldsymbol{G}=\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}=\begin{bmatrix} c & s\\ -s & c\end{bmatrix} \tag{4.2.10}$$

是一正交矩阵。

式 (4.2.9) 表明，一个 2×1 向量 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{G}$ 相乘的结果 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$，相当于将 $\boldsymbol{x}$ 在平面上旋转为 $\boldsymbol{y}$。因此，线性变换 $\boldsymbol{G}$ 称为“平面旋转”，或称作旋转矩阵。

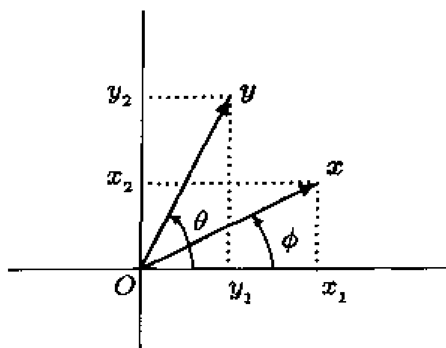


图 4.2.2 旋转

选择不同的旋转角 θ，可以将不同的元素置为零：

(1) 若选择 $\theta = \frac{\pi}{2} - \phi$，则旋转后的向量 $\boldsymbol{y} = \left[0, \sqrt{x_1^2 + x_2^2}\right]^{\mathrm{T}}$；

(2) 当选择 $\theta = \pi - \phi$ 时，旋转后的向量为 $\boldsymbol{y} = \left[-\sqrt{x_1^2 + x_2^2}, 0\right]^{\mathrm{T}}$。

下面的例子说明，经过适当选择参数，反射和旋转可以提供相同的变换结果。

例 4.2.1 假定 $\boldsymbol{x} = [\sqrt{3}, 1]^{\mathrm{T}}$。如果令

$$\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} \cos 30^\circ & \sin 30^\circ \\ \sin 30^\circ & -\cos 30^\circ \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & 1/2 \\ 1/2 & -\sqrt{3}/2 \end{bmatrix}$$

则 $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{x} = [2, 0]^{\mathrm{T}}$。即是说，通过 30° 的反射，可以使向量 $\boldsymbol{x}$ 的第二个元素置为零。另一方面，若令

$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} \cos(-30^\circ) & \sin(-30^\circ) \\ -\sin(-30^\circ) & \cos(-30^\circ) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sqrt{3}/2 & -1/2 \\ 1/2 & \sqrt{3}/2 \end{bmatrix}$$

则 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} = [2, 0]^{\mathrm{T}}$。因此，也可以利用 −30° 的旋转使向量 $\boldsymbol{x}$ 的第二个元素置成零。

应当指出，虽然在某些情况下，反射和旋转可以提供相同的变换结果，但旋转还能够得到反射无法提供的变换结果。因此，下面将主要讨论旋转。

4.2.2 Givens 旋转

早在 1846 年，Jacobi [235] 就提出了将一个对称矩阵简化为对角矩阵的方法。为了纪念这位数学家，式 (4.2.10) 的变换常被称为 Jacobi 旋转。1958 年，Givens [174] 改进了 Jacobi 的方法，提出使用元素满足条件

$$c^2 + s^2 = 1 \tag{4.2.11}$$

的单位矩阵的秩 2 修正矩阵

$$\boldsymbol{G}(i, j, \theta) = \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & c & \cdots & s & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & -s & \cdots & c & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ \\ i \\ \\ j \\ \\ \\ \end{matrix} \tag{4.2.12}$$

（其中 c 位于第 i 列，s 下方的 c 位于第 j 列。）

Givens 的变换方法可以将非对称的矩阵变成对角矩阵，推广并改进了 Jacobi 的方法。由于式 (4.2.12) 的变换比式 (4.2.10) 的变换更常用，人们后来常将 Jacobi 旋转改称 Givens 旋转。Golub 与 Loan 在他们的著名教材“Matrix Computations”中曾强调指出：Jacobi 旋转与 Givens 旋转没有任何不同 [184,p.445]。本书也采用 Givens 旋转这一术语。容易验证，Givens 旋转矩阵 $\boldsymbol{G}(i, j, \theta)$ 为正交矩阵。

若将 Givens 旋转作用于一给定向量 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, \cdots, x_n]^{\mathrm{T}}$，则元素 x_i 和 x_j 通过角度 $\theta = \arctan(s/c)$ 被旋转，而其他元素保持不变。

Givens 旋转具有两个有用的性质。首先，向量 $\boldsymbol{x}$ 的 Givens 旋转结果 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{x}$ 的元素为

$$\left.\begin{aligned} y_i &= cx_i - sx_j \\ y_j &= sx_i + cx_j \\ y_k &= x_k, \quad k \neq i, j \end{aligned}\right\} \tag{4.2.13}$$

只需要 4 次乘法和 2 次加法。其次，选择

$$c = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}, \qquad s = -\frac{x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} \tag{4.2.14}$$

则有

$$y_i = \sqrt{x_i^2 + x_j^2} \qquad y_j = 0 \tag{4.2.15}$$

即将原向量 $\boldsymbol{x}$ 的第 j 个元素 x_j 变为 0。

使用一连串 Givens 旋转，即可将矩阵 $\boldsymbol{X}$ 主对角线以下的元素全部消去，得到上三角矩阵。

下面的例子说明如何应用 Givens 旋转将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 1 行变成基本行向量 $[1, 0, \cdots, 0]$ 的倍数。

例 4.2.2 以 5×4 矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} a & b & c & d \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \end{bmatrix}$$

为例，式中，$\times$ 表示任意元素值。首先，使用 Givens 旋转消去矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的元素 b，即

$$\begin{bmatrix} a & b & c & d \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_0 & s_0 & & \\ -s_0 & c_0 & & \\ & & 1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 & 0 & c & d \\ \# & \# & \times & \times \\ \# & \# & \times & \times \\ \# & \# & \times & \times \\ \# & \# & \times & \times \end{bmatrix}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 只有第 1 列和第 2 列的元素发生变化。然后，再用 Givens 旋转消去元素 c，即

$$\begin{bmatrix} a_1 & 0 & c & d \\ \# & \# & \times & \times \\ \# & \# & \times & \times \\ \# & \# & \times & \times \\ \# & \# & \times & \times \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 & & s_1 & \\ & 1 & & \\ -s_1 & & c_1 & \\ & & & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_2 & 0 & 0 & d \\ * & \# & * & \times \\ * & \# & * & \times \\ * & \# & * & \times \\ * & \# & * & \times \end{bmatrix}$$

第一次变换后的矩阵只有第 1 列和第 3 列的元素发生变化。最后，使用 Givens 旋转消去

元素 d，具体运算为

$$\begin{bmatrix} a_2 & 0 & 0 & d \\ * & \# & * & \times \\ * & \# & * & \times \\ * & \# & * & \times \\ * & \# & * & \times \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_2 & & & s_2 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ -s_2 & & & c_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_3 & 0 & 0 & 0 \\ \times & \# & * & \times \\ \times & \# & * & \times \\ \times & \# & * & \times \\ \times & \# & * & \times \end{bmatrix}$$

在以上三式中，$\#, *, \times$ 分别表示相应变换之后的结果，其具体数值不是我们关心的对象。

第二次变换后的矩阵只有第 1 列和第 4 列的元素发生变化。容易求得三次 Givens 旋转的参数分别为

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}}, \quad s_0 = \frac{b}{\sqrt{a^2+b^2}}, \quad a_1 = \sqrt{a^2+b^2} \\ c_1 &= \frac{a_1}{\sqrt{a_1^2+c^2}}, \quad s_1 = \frac{c}{\sqrt{a_1^2+c^2}}, \quad a_2 = \sqrt{a_1^2+c^2} = \sqrt{a^2+b^2+c^2} \\ c_2 &= \frac{a_2}{\sqrt{a_2^2+d^2}}, \quad s_2 = \frac{d}{\sqrt{a_2^2+d^2}}, \quad a_3 = \sqrt{a_2^2+d^2} = \sqrt{a^2+b^2+c^2+d^2} \end{aligned}$$

因此，三次 Givens 旋转得到的行向量 $[a_3, 0, 0, 0]$ 保持了原行向量 $[a, b, c, d]$ 的范数。

若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，则可以将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的元素 a_{ij} 和 a_{ji} 同时变为零，因为根据

$$\begin{aligned} \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(i,j,\theta)\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}(i,j,\theta) &= \begin{bmatrix} \cos(\theta) & -\sin(\theta) \\ \sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_{ii} & a_{ij} \\ a_{ij} & a_{jj} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos(\theta) & \sin(\theta) \\ -\sin(\theta) & \cos(\theta) \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a'_{ii} & 0 \\ 0 & a'_{jj} \end{bmatrix} \end{aligned}$$

可以求得 Givens 旋转的参数为

$$\tan(2\theta) = \frac{2a_{ij}(a_{ii}+a_{jj})}{a_{jj}^2 - a_{ii}^2} \tag{4.2.16}$$

上述讨论表明，利用一系列 Givens 旋转，可以加速将一个对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对角化，这便构成了对称矩阵特征值分解的 Givens 方法 (或 Jacobi 方法)。

4.2.3 快速 Givens 旋转

以一种可选择的方式引入零的能力使得 Givens 旋转在一些结构化的问题中成了一种重要的置零工具。下面考察 Givens 旋转的快速算法。

1. 1 型 Givens 快速旋转

$$\boldsymbol{F}_1(i,j,\alpha,\beta) = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} 1 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & \beta & \cdots & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & \cdots & \alpha & \cdots & 0 \\ \vdots & & \vdots & & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \\ \begin{matrix} & & i & & j & & \end{matrix} \end{array} \begin{matrix} \\ \\ i \\ \\ j \\ \\ \\ \end{matrix} \tag{4.2.17}$$

2. 2 型 Givens 快速旋转

$$F_2(i,j,\alpha,\beta)=\begin{bmatrix}1&\cdots&0&\cdots&0&\cdots&0\\ \vdots&&\vdots&&\vdots&&\vdots\\ 0&\cdots&1&\cdots&\alpha&\cdots&0\\ \vdots&&\vdots&&\vdots&&\vdots\\ 0&\cdots&\beta&\cdots&1&\cdots&0\\ \vdots&&\vdots&&\vdots&&\vdots\\ 0&\cdots&0&\cdots&0&\cdots&1\end{bmatrix}\begin{matrix}\\ \\ i\\ \\ j\\ \\ \\ \end{matrix} \tag{4.2.18}$$

$$\qquad\qquad\qquad\qquad i \qquad\quad j$$

假定 $F_1(i,j,\alpha,\beta)$ 作用于向量 $x=[x_1,\cdots,x_n]^{\mathrm{T}}$，且 2×2 对角矩阵 $D=\mathrm{diag}(d_1,d_2)$。记

$$M_1=\begin{bmatrix}\beta_1&1\\ 1&\alpha_1\end{bmatrix} \tag{4.2.19}$$

注意到

$$M_1\begin{bmatrix}x_i\\ x_j\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\beta_1x_i+x_j\\ x_i+\alpha_1x_j\end{bmatrix}$$

和

$$M_1^{\mathrm{T}}DM_1=\begin{bmatrix}d_2+\beta_1^2&d_1\beta_1+d_2\alpha_1\\ d_1\beta_1+d_2\alpha_1&d_1+\alpha_1^2d_2\end{bmatrix}$$

如果 $x_j\neq 0$，并取 $\alpha_1=-x_i/x_j$ 和 $\beta_1=-\alpha_1d_2/d_1$，则

$$M_1^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}x_i\\ x_j\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_j(1+\gamma_1)\\ 0\end{bmatrix}$$

和

$$M_1^{\mathrm{T}}DM_1=\begin{bmatrix}d_2(1+\gamma_1)&0\\ 0&d_1(1+\gamma_1)\end{bmatrix}=D_1$$

其中，$\gamma_1=-\alpha_1\beta_1=(d_2/d_1)(x_i/x_j)^2$。

类似地，若 $x_i\neq 0$，并定义

$$M_2=\begin{bmatrix}1&\alpha_2\\ \beta_2&1\end{bmatrix} \tag{4.2.20}$$

其中，$\alpha_2=-x_j/x_i$，$\beta_2=-(d_1/d_2)\alpha_2$，则

$$M_2\begin{bmatrix}x_i\\ x_j\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_i(1+\gamma_2)\\ 0\end{bmatrix}$$

和

$$M_2^{\mathrm{T}}DM_2=\begin{bmatrix}d_1(1+\gamma_2)&0\\ 0&d_2(1+\gamma_2)\end{bmatrix}=D_2$$

其中，$\gamma_2=-\alpha_2\beta_2=(d_1/d_2)(x_j/x_i)^2$。

容易证明，无论对于 $k=1$ 或 2，矩阵 $J=D_k^{1/2}M_kD_k^{-1/2}$ 都是正交的，而且都能将 $M_k\begin{bmatrix}x_i\\ x_j\end{bmatrix}$ 的第二个元素置成零。因此，称 J 为一种旋转，虽然 J 也可以是一反射。

Givens 旋转和快速 Givens 旋转之间的主要区别在于，后者避免了平方根运算，因此要比前者快速。

有必要指出，除了使用 Givens 旋转左乘 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(i,j,\theta)\boldsymbol{A}$，可以将任意 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 化成对角矩阵外，使用 Givens 右乘 $\boldsymbol{AG}(i,j,\theta)$ 也能够达到相同的目的。只使用左乘或右乘的 Givens 旋转称为单边 Givens 旋转。与之不同，对 $n\times n$ 对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 同时使用 Givens 旋转左乘和右乘的方法 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}(i,j,\theta)\boldsymbol{AG}(i,j,\theta)$ 则称为双边 Givens 旋转。

4.2.4 Kogbetliantz 算法

前面讨论了非对称矩阵的单边 Givens 旋转和对称矩阵的双边 Givens 旋转。显然，只采用左乘或者右乘的单边 Givens 旋转，尽管可以使用快速 Givens 旋转，仍然无法实现一个 $n\times n$ 非对称矩阵的快速对角化。因此，需要对 Givens 旋转加以推广，加速非对称矩阵的对角化过程。Givens 旋转的推广有几种不同的形式，这里介绍一种由 Kogbetliantz 提出的算法 [259]，现在习惯上称之为 Kogbetliantz 算法。这种算法的分析是后来由 Forsythe 与 Henrici [159] 给出的。

很明显，为了加速非对称矩阵的对角化过程，应该使用双边旋转变换。然而，又不可能用一个相同的 Givens 旋转同时左乘和右乘需要对角化的非对称矩阵 $\boldsymbol{A}$，因为这样做不能同时使其元素 a_{ij} 和 a_{ji} 变成零。Kogbetliantz 算法的基本思想是对非对称矩阵使用两个不同的 Givens 旋转左乘和右乘 $\boldsymbol{A}$。因此，这是一种双边非对称的 Givens 旋转变换。显然，适用于对称矩阵的双边对称 Givens 旋转是 Kogbetliantz 算法的一个特例。

对于 $i<j$，矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 的 (i,j) 约化由两个 Givens 旋转实现：Givens 旋转 $\boldsymbol{J}(i,j,\theta)$ 作用于第 i 行和第 j 行，另一个 Givens 旋转 $\boldsymbol{J}(i,j,\phi)$ 作用于第 i 列和第 j 列，并且希望所得到的新矩阵 $\boldsymbol{A}_{k+1}$ 在位置 (i,j) 和 (j,i) 处的元素均为零，亦即

$$\begin{bmatrix}\cos\theta & -\sin\theta\\ \sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\alpha_{ii} & \alpha_{ij}\\ \alpha_{ji} & \alpha_{jj}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\cos\phi & \sin\phi\\ -\sin\phi & \cos\phi\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\alpha'_{ii} & 0\\ 0 & \alpha'_{jj}\end{bmatrix} \tag{4.2.21}$$

从上式不难得知，旋转角 θ 和 ϕ 可以由公式

$$\tan(2\theta)=\frac{2(\alpha_{ji}\alpha_{ii}+\alpha_{jj}\alpha_{ij})}{\alpha_{jj}^2+\alpha_{ji}^2-\alpha_{ii}^2-\alpha_{ij}^2} \tag{4.2.22}$$

和

$$\tan\phi=-\frac{\alpha_{ij}-\alpha_{jj}\tan\theta}{\alpha_{ii}-\alpha_{ji}\tan\theta}=\frac{\alpha_{ji}+\alpha_{ii}\tan\theta}{\alpha_{jj}+\alpha_{ij}\tan\theta} \tag{4.2.23}$$

确定，或等价地，由公式

$$\tan(2\phi)=\frac{2(\alpha_{ij}\alpha_{ii}+\alpha_{jj}\alpha_{ji})}{\alpha_{jj}^2+\alpha_{ij}^2-\alpha_{ii}^2-\alpha_{ji}^2} \tag{4.2.24}$$

和

$$\tan\theta=-\frac{\alpha_{ij}+\alpha_{ii}\tan\phi}{\alpha_{jj}-\alpha_{ji}\tan\phi}=\frac{\alpha_{ji}-\alpha_{jj}\tan\phi}{\alpha_{ii}-\alpha_{ij}\tan\phi} \tag{4.2.25}$$

确定。使用上述旋转角 θ 和 ϕ 的 Givens 旋转称为 Kogbetliantz 算法。

从稳定性考虑，在式 (4.2.23) 和式 (4.2.25) 中总是取绝对值比较大的商。如果式 (4.2.23) 中的商为 0/0，则对应的 2×2 矩阵将是零矩阵，在这种情况下两个旋转都应跳过去不做。

比较式 (4.2.16) 与式 (4.2.22) 知，如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是对称的，并且取 $\theta = \phi$，那么式 (4.2.22) 或式 (4.2.24) 将简化为式 (4.2.16)。也就是说，此时 Kogbetliantz 算法简化为一般的双边 Givens 旋转。

有关 Kogbetliantz 算法的具体应用，将在第 6 章结合广义奇异值分解等介绍之。

Householder 变换与 Givens 旋转在矩阵的分解中是两种基本的工具，我们将在以后的各节看到它们的应用。

4.3 矩阵的标准型

在矩阵的线性变换中，相似变换起着十分重要的作用。通常，根据应用目的的不同，我们需要规定相似变换后的矩阵具有不同的规范形式，这种规范形式简称矩阵的标准型。在这些标准型中，矩阵的一些性质显得直观明了。矩阵标准型选择不同，基于相似变换的矩阵分解也就各异。因此，在详细介绍矩阵分解之前，我们先来讨论矩阵的标准型。

矩阵的常用标准型有以下三种：

(1) 对角矩阵：最简单和最理想的标准型，但它不一定总能够实现。

(2) Jordan 型矩阵：为上双对角矩阵，其上对角线的元素为 1 或 0。这种标准型总能够实现，但不一定数值稳定。

(3) 上三角矩阵：实际中最合理的一种折衷方案，因为将原矩阵变为一个三角型矩阵的相似变换可以通过一系列的初等酉变换实现，并且它是数值稳定的变换。

例如，三个 3×3 矩阵

$$\boldsymbol{A}_1 = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_2 = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 1 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{A}_3 = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & 1 \\ 0 & 0 & \lambda_3 \end{bmatrix}$$

都是 Jordan 型矩阵。

矩阵分解的目的是将矩阵分解为某些特定形式的乘积。

定义 4.3.1 如果矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{n \times n}$ 与一个对角矩阵相似，则称 $\boldsymbol{A}$ 是可对角化的 (有时也使用术语“可对角的”)。

定义 4.3.2 两个可对角化的矩阵 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in C^{n \times n}$ 称为同时可对角化的，若存在单个相似矩阵 $\boldsymbol{S} \in C^{n \times n}$ 使得 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{AS}$ 和 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{BS}$ 都是对角的。

矩阵的可对角化是矩阵的奇异值分解、特征值分解和 CS 分解的基础。两个矩阵的同时可对角化是矩阵束分解 (广义特征值分解，广义 Schur 分解等) 的基础。

Jordan 标准型是一组“几乎对角的” (almost diagonal) 矩阵，称作 Jordan 矩阵。对角矩阵是一种最简单的 Jordan 矩阵。一个与给定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 相似的 Jordan 矩阵称为矩阵

$\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 标准型。一旦已知某个矩阵的 Jordan 标准型，那么有关该矩阵的所有线性代数信息 (即线性变换) 也就已知。

定义 4.3.3 (Jordan 块矩阵) 一个 Jordan 块矩阵 $\boldsymbol{J}_k(\lambda)$ 是一个具有以下形式的 $k\times k$ 上三角矩阵：

$$\boldsymbol{J}_k(\lambda)=\begin{bmatrix}\lambda & 1 & & & 0\\ & \lambda & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & 1\\ 0 & & & & \lambda\end{bmatrix} \tag{4.3.1}$$

而 Jordan 矩阵是 Jordan 块矩阵的直 (接) 和，即

$$\boldsymbol{J}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{J}_{n_1}(\lambda_1) & & & 0\\ & \boldsymbol{J}_{n_2}(\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \boldsymbol{J}_{n_k}(\lambda_k)\end{bmatrix},\qquad n_1+\cdots+n_k=n \tag{4.3.2}$$

其中，阶数 n_i 可以相同，而 λ 值不一定不同。

下面的定理叫做 Jordan 标准型定理。

定理 4.3.1 令 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 为一已知复矩阵，则存在一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{S}\in C^{n\times n}$ 满足条件

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}&=\boldsymbol{S}\begin{bmatrix}\boldsymbol{J}_{n_1}(\lambda_1) & & & 0\\ & \boldsymbol{J}_{n_2}(\lambda_2) & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \boldsymbol{J}_{n_k}(\lambda_k)\end{bmatrix}\boldsymbol{S}^{-1}\\ &=\boldsymbol{SJS}^{-1},\qquad n_1+\cdots+n_k=n\end{aligned} \tag{4.3.3}$$

$\boldsymbol{A}$ 的 Jordan 矩阵是唯一的 (对角 Jordan 块的排列次序允许不同)。式中，特征值 $\lambda_i\,(i=1,2,\cdots,k)$ 不一定不同。如果 $\boldsymbol{A}$ 是具有实特征值的实矩阵，则相似矩阵 $\boldsymbol{S}$ 可取实矩阵。

证明 见文献 [224]。

与矩阵分解密切相关的其他常用矩阵标准型还有三角矩阵和三对角矩阵，我们将在以后各节结合相似变换和矩阵标准型详细解说矩阵的各种分解。

4.4 矩阵分解的分类

所谓矩阵的分解 (decomposition 或 factorization)，就是通过线性变换，将某个给定或已知的矩阵分解为二个或三个矩阵标准型的乘积 (个别情况下分解为两个矩阵标准型之和)。

虽然矩阵的分解有十几种之多，看似零乱，但是它们之间实则有着明显的类属。在这里，我们主要根据矩阵分解后得到的矩阵的标准型以及是对单个矩阵还是两个矩阵组成的矩阵束 (matrix pencil) 或矩阵对 (matrix pair) 进行分解来划分矩阵的分解类别。

1. 单个矩阵的分解

根据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解后的矩阵的标准型，可分为以下四大类。

(1) 对角化分解

这类分解是通过正交变换，将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对角化的，包括以下三种形式。

① 奇异值分解 (SVD)：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}$ 或 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AV}=\boldsymbol{\Sigma}$，其中，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 二者为酉矩阵，$\boldsymbol{\Sigma}$ 为对角矩阵 (针对一般矩阵的对角化分解)。

② 特征值分解 (EVD)：$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V\Sigma V}^{\mathrm{H}}$ 或 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U\Sigma U}^{\mathrm{H}}$ (针对对称矩阵的对角化分解)。

③ CS 分解：可看作是正交矩阵分块的同时对角化分解。

(2) 三角化分解

这类分解将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解为正交矩阵与三角矩阵之积，或分解为一个上三角矩阵与一个下三角矩阵之积，主要有以下三种形式：

① Cholesky 分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{GG}^{\mathrm{T}}$，其中，$\boldsymbol{G}$ 为下三角矩阵 (针对对称正定矩阵的三角化分解)。

② QR 分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$ 或 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}$，其中，$\boldsymbol{Q}$ 是正交矩阵，而 $\boldsymbol{R}$ 是上三角矩阵 (针对一般矩阵的三角化分解)。

③ LU 分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LU}$，其中，$\boldsymbol{L}$ 是单位下三角矩阵，而 $\boldsymbol{U}$ 是上三角矩阵 (针对非奇异矩阵的三角化分解)。

(3) 三角 - 对角化分解

将矩阵分解为三个矩阵标准型 (两个三角矩阵和一个对角矩阵) 之积，或分解为两个矩阵标准型 (对角矩阵和上三角矩阵) 之和。这类分解有以下形式。

① LDM$^{\mathrm{T}}$ 分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDM}^{\mathrm{T}}$，其中，$\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{M}$ 为单位下三角矩阵，而 $\boldsymbol{D}$ 为对角矩阵 (针对非对称矩阵的三角 - 对角化分解)。

② LDL$^{\mathrm{T}}$ 分解：$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{LDL}^{\mathrm{T}}$ (针对对称矩阵的三角 - 对角化分解)。

③ Schur 分解：$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AQ}=\boldsymbol{D}+\boldsymbol{N}$，其中，$\boldsymbol{Q}$ 是酉矩阵，$\boldsymbol{D}$ 是对角矩阵，而 $\boldsymbol{N}$ 是严格上三角矩阵 (针对复矩阵的三角 - 对角化分解)。

(4) 三对角化分解

Householder 三对角化分解：$\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AH}=\boldsymbol{T}$，其中，$\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2\cdots\boldsymbol{H}_{n-2}$ 为 Householder 变换之积，且 $\boldsymbol{T}$ 是三对角矩阵。

2. 矩阵束的分解

矩阵束的分解主要用于求解矩阵束的广义特征值分解 (GEVD) 问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}(\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0})$ 的 QZ 方法中，它涉及两个矩阵的同时分解。这类分解的主要形式是广义 Schur 分解。

广义 Schur 分解：$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AZ}=\boldsymbol{T}$ 和 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BZ}=\boldsymbol{S}$，其中，$\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 为酉矩阵，而 $\boldsymbol{T}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 为上三角矩阵。

实现广义 Schur 分解需要先使用 Hessenberg 三对角化分解：$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AZ}=\boldsymbol{H}$ 和 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{BZ}=$

$\boldsymbol{T}$，其中，$\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 为正交矩阵，$\boldsymbol{H}$ 为上 Hessenberg 矩阵，而 $\boldsymbol{T}$ 是上三角矩阵。

更形象些，我们可以把矩阵分解的上述各种类型画成图 4.4.1 所示的矩阵分解树 (呈平躺形式)。

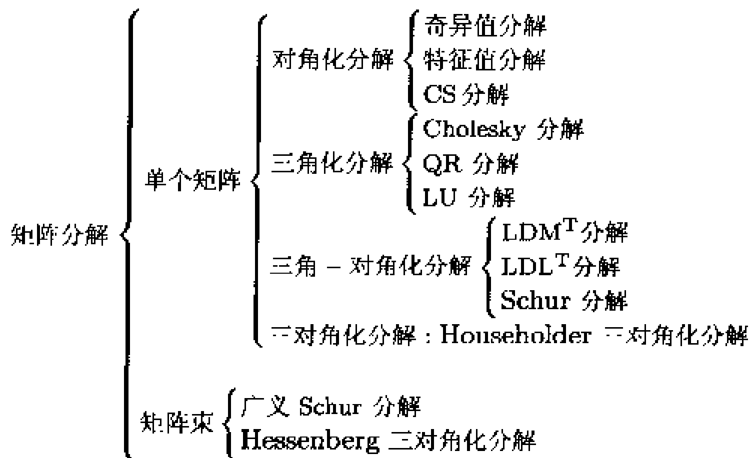


图 4.4.1 矩阵的分解树

从下节起，我们将分类具体介绍矩阵的各种分解。

4.5 对角化分解

任意矩阵的奇异值分解和对称矩阵的特征值分解是工程中应用最广泛的两种矩阵分解。奇异值分解有多种推广，例如两个矩阵乘积的奇异值分解和矩阵束的广义奇异值分解等。特征值分解也有一种以矩阵束为对象的推广即广义特征值分解。我们将在第 6 章专题解说奇异值分解及其推广的定义、性质、计算方法与应用。由于特征值分解的主要应用是特征子空间分析方法，所以将在第 8 章中详细讨论之。本节只介绍对角化分解类中的 CS 分解。

定理 4.5.1 [106] (CS 分解) 若 $(k+j)\times(k+j)$ 矩阵

$$\boldsymbol{Q}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_{11} & \boldsymbol{Q}_{12}\\ \boldsymbol{Q}_{21} & \boldsymbol{Q}_{22}\end{bmatrix}$$

是正交的，其中，$\boldsymbol{Q}_{11}$ 是 $k\times k$ 矩阵，并且 $k\geqslant j$；则存在正交矩阵 $\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{V}_1\in R^{k\times k}$ 和正交矩阵 $\boldsymbol{U}_2,\boldsymbol{V}_2\in R^{j\times j}$ 使得

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{U}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_{11} & \boldsymbol{Q}_{12}\\ \boldsymbol{Q}_{21} & \boldsymbol{Q}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{V}_2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{k-j} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{C} & \boldsymbol{S}\\ \boldsymbol{O} & -\boldsymbol{S} & \boldsymbol{C}\end{bmatrix} \tag{4.5.1}$$

其中

$$\boldsymbol{C}=\mathrm{diag}(c_1,c_2,\cdots,c_j),\qquad c_i=\cos\theta_i \tag{4.5.2}$$

$$\boldsymbol{S}=\mathrm{diag}(s_1,s_2,\cdots,s_j),\qquad s_i=\sin\theta_i \tag{4.5.3}$$

且 $0 \leqslant \theta_1 \leqslant \theta_2 \leqslant \cdots \leqslant \theta_j \leqslant \pi/2$。

粗略地讲，CS 分解相当于将一个正交矩阵的各个分块同时对角化。

例 4.5.1 矩阵

$$Q = \begin{bmatrix} -0.761 & -0.698 & -0.006 \\ 0.548 & -0.555 & -0.626 \\ 0.433 & -0.451 & 0.780 \end{bmatrix}$$

是正交的。因此，选择正交矩阵

$$U = \begin{bmatrix} 0.999 & -0.010 & 0.000 \\ -0.010 & -0.999 & 0.000 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 \end{bmatrix}$$

$$V = \begin{bmatrix} -0.721 & -0.692 & 0.000 \\ -0.692 & 0.721 & 0.000 \\ 0.000 & 0.000 & 1.000 \end{bmatrix}$$

则有

$$U^{\mathrm{T}}QV = \begin{bmatrix} 1.000 & 0.000 & 0.000 \\ 0.000 & 0.780 & 0.625 \\ 0.000 & -0.625 & 0.780 \end{bmatrix}$$

换言之，在定理 4.5.1 中相当于取 $k=2, j=1$，并且 $c_1 = 0.780$，$s_1 = 0.625$。

4.6 Cholesky 分解与 LU 分解

本节讨论三角化分解中的两种形式：Cholesky 分解和 LU 分解。由于 QR 分解应用非常广泛，所以我们将在 4.7 节专题讨论它。

4.6.1 Cholesky 分解

设 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}] \in R^{n\times n}$ 是对称正定矩阵，$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Cholesky 分解，其中，$\boldsymbol{G} \in R^{n\times n}$ 是一个具有正的对角线元素的下三角矩阵，即

$$G = \begin{bmatrix} g_{11} & & & 0 \\ g_{21} & g_{22} & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \\ g_{n1} & g_{n2} & \cdots & g_{nn} \end{bmatrix} \tag{4.6.1}$$

比较 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}$ 两边，易得

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^{j} g_{jk} g_{ik}$$

从而有

$$g_{jj} g_{ij} = a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} g_{jk} g_{ik} = v(i) \tag{4.6.2}$$

如果知道了 $\boldsymbol{G}$ 的前 $j-1$ 列，那么 $v(i)$ 就是可计算的。

在式 (4.6.2) 中令 $i=j$，立即有 $g_{jj}^2=v(j)$。然后，由式 (4.6.2) 得

$$g_{ij}=v(i)/g_{jj}=v(i)/\sqrt{v(j)} \tag{4.6.3}$$

总结以上讨论，可得到计算 Cholesky 分解的下述 MATLAB 算法 [184]：

```
for j = 1 : n
  for i = j : n
    v(i) = a_ij;
    for k = 1 : j-1
      v(i) = v(i) - g_jk g_ik;
    end
    g_ij = v(i)/sqrt(v(j));
  end
end
```

这一算法叫做 Gaxpy Cholesky 算法。Gaxpy 意即广义的 saxpy，而“saxpy”是在软件包 LINPACK 中被定义的术语，它是“标量 $\alpha x+y$”的英文 (scalar alpha x plus y) 缩写。saxpy 运算定义为

$$z=\alpha x+y \Longrightarrow z_i=\alpha x_i+y_i$$

而 Gaxpy 运算系指矩阵运算 $\boldsymbol{z}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{y}$。

以上分析结果可以归纳为下面的定理。

定理 4.6.1 (Cholesky 分解) 如果 $\boldsymbol{A}\in R^{n\times n}$ 是对称正定矩阵，则 Cholesky 分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}$ 是唯一的，其中，下三角矩阵 $\boldsymbol{G}\in R^{n\times n}$ 的非零元素由式 (4.6.3) 决定。

下三角矩阵 $\boldsymbol{G}$ 称为 Cholesky 三角。另外，Cholesky 分解也谓之平方根方法，因为下三角矩阵 $\boldsymbol{G}$ 可以视为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的“平方根”。

一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 可以通过 Cholesky 分解求得，即有

$$\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{G}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{G}^{-1} \tag{4.6.4}$$

其中，$\boldsymbol{G}^{-T}=(\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}})^{-1}$。

例 4.6.1 考虑利用 Cholesky 分解求解矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$。由于

$$\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{b} \quad \Longrightarrow \quad \boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{h}$$

其中，$\boldsymbol{h}=\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{b}$，或等价为 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{h}=\boldsymbol{b}$。比较 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{h}=\boldsymbol{b}$ 两边的向量元素，易得向量 $\boldsymbol{h}$ 的元素 h_i 的递推计算公式如下：

$$\left.\begin{aligned} &h_1=b_1/g_{11}\\ &h_i=\frac{1}{g_{ii}}\left(b_i-\sum_{k=1}^{i-1}g_{ki}h_k\right),\quad i=2,3,\cdots,n \end{aligned}\right\} \tag{4.6.5}$$

现在，方程 $Ax = b$ 的解等价为 $G^T x = h$ 的解。注意到 G^T 为上三角矩阵，因此 x 可以利用熟知的回代法求出：

$$\left.\begin{aligned} x_n &= h_n/g_{nn} \\ x_i &= \frac{1}{g_{ii}}\left(h_i - \sum_{k=1}^{n-i} g_{i+k,i}x_{i+k}\right), \qquad i = n-1, n-2, \cdots, 1 \end{aligned}\right\} \tag{4.6.6}$$

4.6.2 LU分解

在求解线性方程组 $Ax = b$ 时，如果能够通过正交变换，将 $m \times n$ 矩阵 A 分解为 $A = LU$，其中，L 为 $m \times m$ 单位下三角矩阵 (对角元素为 1 的下三角矩阵)；并且 U 是 A 的 $m \times n$ 阶梯型矩阵。这样一来，线性方程组 $Ax = b$ 即变为 $LUx = b$，它可以简单求解。

为了求解线性方程组 $LUx = b$，令 $y = Ux$。于是方程组变为 $Ly = b$，解之得 y。再求解 $Ux = y$ 即得方程组的解向量 x。于是，通过矩阵的 LU 分解，线性矩阵方程 $Ax = b$ 的求解分为两个三角矩阵方程的求解，具体算法如下：

步骤 1　计算 $A = LU$；

步骤 2　用前向回代法求解下三角矩阵方程 $Ly = b$；

步骤 3　用后向回代法求解上三角矩阵方程 $Ux = y$。

上面的算法可以推广到线性矩阵方程 $AX = B$ 的求解，其中，$A \in R^{n\times n}$ 非奇异，$B, X \in R^{n\times p}$。记 $X = [x_1, x_2, \cdots, x_p]$，$B = [b_1, b_2, \cdots, b_p]$。

以下算法可用于求出未知的矩阵 X：

计算 $JA = LU$

for $k = 1 : p$

　　求解 $Ly = Jb_k$

　　求解 $Ux_k = y$

end

其中，J 是 $n \times n$ 反射矩阵，即 $J = [e_n, e_{n-1}, \cdots, e_1]$，而 e_k 为基本向量。

因此，关键问题在于矩阵 A 的 LU 分解。

定理 4.6.2 (LU 分解)　如果 $A \in R^{n\times n}$ 非奇异，并且其 LU 分解存在的话，则 A 的 LU 分解是唯一的，且 $\det(A) = u_{11}u_{22}\cdots u_{nn}$。

证明　令 $A = L_1U_1$ 和 $A = L_2U_2$ 是非奇异矩阵 A 的两个 LU 分解，则 $L_1U_1 = L_2U_2$。由于 $L_2^{-1}L_1$ 是单位下三角矩阵，并且 $U_2U_1^{-1}$ 是上三角矩阵，所以这两个矩阵必定都等于单位矩阵，否则它们不可能相等。就是说，$L_1 = L_2, U_1 = U_2$，即 LU 分解是唯一的。若 $A = LU$，则 $\det(A) = \det(LU) = \det(L)\det(U) = \det(U) = u_{11}u_{22}\cdots u_{nn}$。■

下面介绍矩阵的 LU 分解的初等行变换方法。

第 1 章的满秩分解算法几乎可以照搬到 LU 分解中。

算法 4.6.1 (矩阵的 LU 分解的初等行变换算法)

步骤 1 利用初等行变换将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 化为阶梯型矩阵 $\boldsymbol{U}$，即

$$\boldsymbol{A} \xrightarrow{\boldsymbol{E}_1} [\quad] \xrightarrow{\boldsymbol{E}_2} \cdots \xrightarrow{\boldsymbol{E}_k} [\quad] = \boldsymbol{U}$$

步骤 2 对单位矩阵执行与步骤 1 相应的初等行逆变换，得到单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$，即

$$\boldsymbol{I} \xrightarrow{\boldsymbol{E}_k^{-1}} [\quad] \xrightarrow{\boldsymbol{E}_{k-1}^{-1}} \cdots \xrightarrow{\boldsymbol{E}_1^{-1}} [\quad] = \boldsymbol{L}$$

输出 LU 分解由 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$ 给出。

关于上述算法，有两点注意事项：

(1) 步骤 2 的初等行逆变换 E_i^{-1} 是步骤 1 对应的初等行变换 E_i 的逆变换。

(2) 若在步骤 1 中定义 $\alpha R_p + R_q$ 为将第 p 行元素乘常数 α 之后，加给第 q 行的初等行变换，则步骤 2 中相应初等行逆变换 $(\alpha R_p + R_q)^{-1}$ 定义为 $-\alpha R_p + R_q$。

例 4.6.2 用算法 4.6.1 求矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -4 \\ -4 & -5 & 3 & -8 & 2 \\ 2 & -5 & -4 & 1 & 16 \\ -6 & 0 & 7 & -3 & 2 \end{bmatrix}$$

的 LU 分解。

解 (1) 步骤 1 使用初等行变换将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 变换为阶梯型矩阵 $\boldsymbol{U}$：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -4 \\ -4 & -5 & 3 & -8 & 2 \\ 2 & -5 & -4 & 1 & 16 \\ -6 & 0 & 7 & -3 & 2 \end{bmatrix} \xrightarrow[3R_1+R_4]{2R_1+R_2,\,-R_1+R_3} \boldsymbol{A}_1 = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -4 \\ 0 & 3 & 1 & 2 & -6 \\ 0 & -9 & -3 & -4 & 20 \\ 0 & 12 & 4 & 12 & -10 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}_1 = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -4 \\ 0 & 3 & 1 & 2 & -6 \\ 0 & -9 & -3 & -4 & 20 \\ 0 & 12 & 4 & 12 & -10 \end{bmatrix} \xrightarrow[-4R_2+R_4]{3R_2+R_3} \boldsymbol{A}_2 = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -4 \\ 0 & 3 & 1 & 2 & -6 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 14 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{A}_2 = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -4 \\ 0 & 3 & 1 & 2 & -6 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 4 & 14 \end{bmatrix} \xrightarrow{-2R_3+R_4} \boldsymbol{A}_3 = \begin{bmatrix} 2 & 4 & -1 & 5 & -4 \\ 0 & 3 & 1 & 2 & -6 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10 \end{bmatrix} = \boldsymbol{U}$$

(2) 步骤 2 使用初等行逆变换将 4×4 单位矩阵变成单位下三角矩阵：

$$\boldsymbol{I}_4 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow{2R_3+R_4} \boldsymbol{C}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{C}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 & 1 \end{bmatrix} \xrightarrow[-3R_2+R_3]{4R_3+R_4} \boldsymbol{C}_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -3 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$C_2=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&-3&1&0\\0&4&2&1\end{bmatrix}\xrightarrow[-2R_1+R_2]{3R_2+R_4,R_1+R_3}L=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\-2&1&0&0\\1&-3&1&0\\-3&4&2&1\end{bmatrix}$$

(3) 输出 矩阵 A 的 LU 分解:

$$A=\begin{bmatrix}2&4&-1&5&-4\\-4&-5&3&-8&2\\2&-5&-4&1&16\\-6&0&7&-3&2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\-2&1&0&0\\1&-3&1&0\\-3&4&2&1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2&4&-1&5&-4\\0&3&1&2&-6\\0&0&0&2&2\\0&0&0&0&10\end{bmatrix}$$
$$=LU$$

事实上,也可以利用步骤 1 将 A 变换为阶梯型矩阵 U 过程中的有关矩阵 A, A_1, A_2, U 的主元列构造单位下三角矩阵 L。具体方法是:

(1) 取出 A 的第 1 个主元所在的列 (不失一般性,假定为第 1 列),将其归一化 (第一个元素为 1) 后,作为 L 的第 1 列。

(2) 取出 A_{i-1} 的第 i 个主元及下面的同列元素构成的部分组成一个 $(n-i)\times 1$ 向量,将其归一化后,作为 L 的第 i 列的下半部分,其中,$i=2,3,\cdots,n$。

针对例 4.6.2,矩阵 A, A_1, A_2, A_3 被抽出的主元列及其归一化结果分别为

$$\begin{bmatrix}2\\-4\\2\\-6\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3\\-9\\12\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2\\4\end{bmatrix}\begin{bmatrix}10\end{bmatrix}\xrightarrow{\text{各列归一化}}\begin{bmatrix}1&0&0&0\\-2&1&0&0\\1&-3&1&0\\-3&4&2&1\end{bmatrix}=L$$

这与运用初等行逆变换的结果相同。

4.7 QR分解及其应用

矩阵的 QR 分解是在工程中应用最广泛的一种矩阵分解。先看 QR 分解的性质。

4.7.1 QR 分解的性质

定理 4.7.1 (QR 分解) 若 $A\in R^{m\times n}$,且 $m\geqslant n$,则存在列正交的矩阵 $Q\in R^{m\times m}$ 和上三角矩阵 $R\in R^{m\times n}$ 使得 $A=QR$。当 $m=n$ 时,Q 是正交矩阵。如果 A 是非奇异的 $n\times n$ 矩阵,则 R 的所有对角线元素均为正,并且在这种情况下 Q 和 R 二者是唯一的。若 A 是复矩阵,则 Q 和 R 取复值。

证明 见文献 [224]。

注意到 $A^{\mathrm T}A=(QR)^{\mathrm T}(QR)=R^{\mathrm T}R$,因此可以得出结论:$G=R^{\mathrm T}$ 是 $A^{\mathrm T}A$ 的下三角 Cholesky 因子。由于这个原因,在关于估计的文献中,矩阵 R 常称为平方根滤波器 (算子)。

下面的引理称为矩阵分解引理 [404],[184],它在矩阵的 QR 分解的应用中是一个有用的结果。

引理 4.7.1　若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是任意两个 $m\times n$ 矩阵，则

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B} \tag{4.7.1}$$

当且仅当存在一个 $m\times m$ 酉矩阵 $\boldsymbol{Q}$，使得

$$\boldsymbol{Q}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B} \tag{4.7.2}$$

证明　充分性证明：若 $\boldsymbol{QA}=\boldsymbol{B}$，并且 $\boldsymbol{Q}$ 是酉矩阵，则 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$。

必要性证明：令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的奇异值分解分别为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}_A\boldsymbol{\Sigma}_A\boldsymbol{V}_A^{\mathrm{H}}$$
$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}_B\boldsymbol{\Sigma}_B\boldsymbol{V}_B^{\mathrm{H}}$$

式中，$\boldsymbol{U}_A$ 和 $\boldsymbol{U}_B$ 均为 $m\times m$ 酉矩阵；$\boldsymbol{V}_A$ 和 $\boldsymbol{V}_B$ 都是 $n\times n$ 酉矩阵；而 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_A$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_B$ 分别包含了矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的非负奇异值。由于

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}_A\boldsymbol{\Sigma}_A^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Sigma}_A\boldsymbol{V}_A^{\mathrm{H}}$$
$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}=\boldsymbol{V}_B\boldsymbol{\Sigma}_B^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Sigma}_B\boldsymbol{V}_B^{\mathrm{H}}$$

若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$，则有 $\boldsymbol{V}_A=\boldsymbol{V}_B$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_A=\boldsymbol{\Sigma}_B$。定义矩阵

$$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{U}_B\boldsymbol{U}_A^{\mathrm{H}}$$

易知

$$\boldsymbol{QA}=\boldsymbol{U}_B\boldsymbol{U}_A^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}_B\boldsymbol{U}_A\boldsymbol{U}_A\boldsymbol{\Sigma}_A\boldsymbol{V}_A^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}_B\boldsymbol{\Sigma}_B\boldsymbol{V}_B^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{B}$$

这就证明了引理的必要条件。　■

下面介绍三种主要的 QR 分解算法 (采用修正 Gram-Schmidt 法的 QR 分解、采用 Householder 变换的 QR 分解和采用 Givens 旋转的 QR 分解) 以及它们在自适应信号处理中的典型应用。

4.7.2 采用修正 Gram-Schmidt 法的 QR 分解

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解可以利用 Gram-Schmidt 正交化方法实现。

Gram-Schmidt 正交化方法原本是一种由 n 个向量 $\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n$ 构造互相正交且范数为 1 的向量 $\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n$ 的方法。将向量 $\boldsymbol{a}_1$ 标准正交化的结果取作 $\boldsymbol{q}_1$，即

$$\left.\begin{aligned}R_{11}&=\|\boldsymbol{a}_1\|\\ \boldsymbol{q}_1&=\boldsymbol{q}_1/R_{11}\end{aligned}\right\} \tag{4.7.3}$$

然后，从 $\boldsymbol{a}_2$ 中除去与 $\boldsymbol{a}_1$ 平行的分量，再进行标准正交化，并将结果取作 $\boldsymbol{q}_2$，则有

$$\left.\begin{aligned}R_{12}&=\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_2\\ R_{22}&=\|\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{q}_1R_{12}\|\\ \boldsymbol{q}_2&=(\boldsymbol{a}_2-\boldsymbol{q}_1R_{12})/R_{22}\end{aligned}\right\} \tag{4.7.4}$$

进而，又从 $\boldsymbol{a}_3$ 除去与 $\boldsymbol{a}_1$ 和 $\boldsymbol{a}_2$ 平行的两个分量，再进行标准正交化，并使用该结果作 $\boldsymbol{q}_3$，即有

$$\left.\begin{aligned} R_{13} &= \boldsymbol{q}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_3 \\ R_{23} &= \boldsymbol{q}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_3 \\ R_{33} &= \|\boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{q}_1 R_{13} - \boldsymbol{q}_2 R_{23}\| \\ \boldsymbol{q}_3 &= (\boldsymbol{a}_3 - \boldsymbol{q}_1 R_{13} - \boldsymbol{q}_2 R_{23})/R_{23} \end{aligned}\right\} \tag{4.7.5}$$

如此继续，则对于 $\boldsymbol{q}_k (2 \leqslant k \leqslant n)$ 有

$$\left.\begin{aligned} R_{jk} &= \boldsymbol{q}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_k, \qquad 1 \leqslant j \leqslant k-1 \\ R_{kk} &= \|\boldsymbol{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1} \boldsymbol{q}_j R_{jk}\| \\ \boldsymbol{q}_k &= \left(\boldsymbol{a}_k - \sum_{j=1}^{k-1} \boldsymbol{q}_j R_{jk}\right)/R_{33} \end{aligned}\right\} \tag{4.7.6}$$

容易验证，$\boldsymbol{q}_i$ 是标准正交基，即满足

$$\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{q}_j = \delta_{ij} \tag{4.7.7}$$

其中，δ_{ij} 为 Kronecker δ 函数。如果令 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量为 $\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n$，则以 $\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_n$ 为列向量的矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 之间有下列关系：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR} \tag{4.7.8}$$

又由于 $\boldsymbol{q}_i$ 组成标准正交基，所以

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}_n$$

将 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 重写在同一矩阵，应用以上 Gram-Schmidt 正交化的方法叫做经典 Gram-Schmidt 正交化法，其过程可以用图 4.7.1 说明。

图4.7.1 QR分解的经典Gram-Schmidt正交化算法

Björck [46] 发现，对经典 Gram-Schmidt 正交化法加以修正，使上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的元素不是按列，而是按行计算时，舍入误差将变小。这样一种修正方法叫做修正 Gram-Schmidt 正交化算法。具体说来，$\boldsymbol{a}_1$ 的标准正交化结果取作 $\boldsymbol{q}_1$ (这与经典 Gram-Schmidt 正交化法相同)，但同时需要从 $\boldsymbol{a}_2,\boldsymbol{a}_3,\cdots,\boldsymbol{a}_n$ 预先减去与 $\boldsymbol{a}_1$ 平行的分量，即

$$\left.\begin{aligned} &R_{11}=\|\boldsymbol{a}_1\|, \quad \boldsymbol{q}_1=\boldsymbol{a}_1/R_{11} \\ &R_{1j}=\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_j, \quad \boldsymbol{a}_j^{(1)}=\boldsymbol{a}_j-\boldsymbol{q}_1R_{1j}, \qquad 2\leqslant j\leqslant n \end{aligned}\right\} \tag{4.7.9}$$

经过以上运算后，向量 $\boldsymbol{a}_2^{(1)},\boldsymbol{a}_3^{(1)},\cdots,\boldsymbol{a}_n^{(1)}$ 与 $\boldsymbol{q}_1$ 正交。

然后，将 $\boldsymbol{a}_2^{(1)}$ 标准正交化，并从 $\boldsymbol{a}_3^{(1)},\boldsymbol{a}_4^{(1)},\cdots,\boldsymbol{a}_n^{(1)}$ 减去与 $\boldsymbol{a}_2^{(1)}$ 平行的分量，得

$$\left.\begin{aligned} &R_{22}=\|\boldsymbol{a}_2^{(1)}\|, \quad \boldsymbol{q}_2=\boldsymbol{a}_2/R_{22} \\ &R_{2j}=\boldsymbol{q}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_j^{(1)}, \quad \boldsymbol{a}_j^{(2)}=\boldsymbol{a}_j^{(1)}-\boldsymbol{q}_2R_{2j}, \qquad 3\leqslant j\leqslant n \end{aligned}\right\} \tag{4.7.10}$$

这样构造的向量 $\boldsymbol{a}_3^{(2)},\boldsymbol{a}_4^{(2)},\cdots,\boldsymbol{a}_n^{(2)}$ 与 $\boldsymbol{q}_1$，$\boldsymbol{q}_2$ 均正交。重复这一过程，就可以将 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 重写在同一矩阵。图 4.7.2 示出了修正 Gram-Schmidt 正交化算法的运算过程。

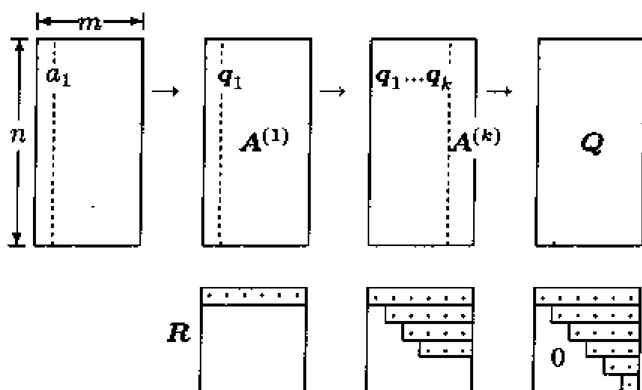


图 4.7.2 QR 分解的修正 Gram-Schmidt 正交化算法

为了分析误差的情况，假定 $\boldsymbol{q}_2$ 包含有少量与 $\boldsymbol{q}_1$ 平行的分量，即 $\boldsymbol{q}_2+\varepsilon\boldsymbol{q}_1$。应用经典 Gram-Schmidt 法，求 $\boldsymbol{q}_2$ 和 $\boldsymbol{a}_3$ 的内积 R_{23} 时，具体计算如下：

$$(\boldsymbol{q}_2^{\mathrm{H}}+\varepsilon\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{H}})\boldsymbol{a}_3=\boldsymbol{q}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_3+\varepsilon\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_3 \tag{4.7.11}$$

而在修正 Gram-Schmidt 法中，求 R_{23} 时计算的是 $\boldsymbol{q}_2$ 和 $\boldsymbol{a}_2^{(1)}=\boldsymbol{a}_3-R_{13}\boldsymbol{q}_1$ 的内积，即

$$(\boldsymbol{q}_2^{\mathrm{H}}+\varepsilon\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{a}_3-R_{13}\boldsymbol{q}_1)=\boldsymbol{q}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_3+\varepsilon\boldsymbol{q}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_3-\varepsilon R_{13}=\boldsymbol{q}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_3 \tag{4.7.12}$$

比较式 (4.7.11) 与式 (4.7.12)，可以看出，经典方法比修正方法多第二项误差。尤其是当 $|R_{23}|\ll|R_{13}|$ 时，修正 Gram-Schmidt 法减小误差的效果将更明显。

4.7.3 Householder QR 分解

Householder 变换可以实现任意 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解，其原理是使用变维向量的 Householder 变换，使得该向量除第一个元素外，其他元素皆变成 0。

根据 Householder 变换一节的分析，欲使一个 p 维向量 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_p]^{\mathrm{T}}$ 的第 1 个元素后面的所有元素变为 0，则 p 维的 Householder 向量应取

$$\boldsymbol{w}=\frac{\boldsymbol{x}-\beta\boldsymbol{e}_1}{\sqrt{\beta(\beta-x_1)}} \tag{4.7.13}$$

式中

$$\bar{\beta}=-|x_1|\|\boldsymbol{x}\|,\qquad \beta=-\frac{x_1}{|x_1|}\|\boldsymbol{x}\| \tag{4.7.14}$$

假定 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列分块形式为

$$\boldsymbol{A}_{m\times n}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n]$$

首先令 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{a}_1=[a_{11},a_{21},\cdots,a_{m1}]^{\mathrm{T}}$，并取 $p=m$，则按照式 (4.7.13) 和式 (4.7.14)，可以计算得到 $\boldsymbol{u}_1=\boldsymbol{w}_m$。此时，

$$\boldsymbol{H}_1=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{T}}\quad\rightarrow\quad \boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{a}_1^{(1)},\boldsymbol{a}_2^{(1)},\cdots,\boldsymbol{a}_n^{(1)}] \tag{4.7.15}$$

变换后，矩阵 $\boldsymbol{A}_1$ 的第 1 列 $\boldsymbol{a}_1^{(1)}$ 的第一个元素等于 $(a_{11}^2+a_{21}^2+\cdots+a_{m1}^2)^{1/2}$，而该列的其他元素全部为 0。

第二步针对矩阵 $\boldsymbol{A}_1$ 的第 2 列 $\boldsymbol{a}_2^{(1)}$，令 $p=m-1$ 和

$$\boldsymbol{x}=\left[a_{22}^{(1)},a_{32}^{(1)},\cdots,a_{m2}^{(1)}\right]^{\mathrm{T}}$$

又可按照式 (4.7.13) 和式 (4.7.14) 求出 $(m-1)$ 维向量 $\boldsymbol{w}_{m-1}$。此时，取 $\boldsymbol{u}_2=\begin{bmatrix}0\\ \boldsymbol{w}_{m-1}\end{bmatrix}$，又可得到

$$\boldsymbol{H}_2=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{u}_2^{\mathrm{T}}\quad\rightarrow\quad \boldsymbol{A}_2=\boldsymbol{H}_2\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}=\left[\boldsymbol{a}_1^{(1)},\boldsymbol{a}_2^{(2)},\cdots,\boldsymbol{a}_n^{(2)}\right] \tag{4.7.16}$$

变换后，矩阵 $\boldsymbol{A}_2$ 的第 1 列与 $\boldsymbol{A}_1$ 的第 1 列相同，而第 2 列 $\boldsymbol{a}_1^{(1)}$ 的第一个元素等于 $a_{12}^{(1)}$，第二个元素等于 $\left[|a_{22}^{(1)}|^2+|a_{32}^{(1)}|^2+\cdots+|a_{m2}^{(1)}|^2\right]^{1/2}$，而该列的其他元素全部为 0。

类似地，又可针对矩阵 $\boldsymbol{A}_2$ 的第 3 列设计 Householder 变换矩阵 $\boldsymbol{H}_3$，使得 $\boldsymbol{A}_2$ 的第一、二个元素保持不变，其他元素组成的 $m-2$ 维向量 $\boldsymbol{x}=\left[a_{33}^{(2)},a_{43}^{(2)},\cdots,a_{m3}^{(2)}\right]^{\mathrm{T}}$ 变换为除第一个元素外的全部元素变为 0。

假定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 经过 $k-1$ 次 Householder 变换后，已变成 $\boldsymbol{A}^{(k-1)}$，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^{(k-1)}&=\boldsymbol{H}_{k-1}\boldsymbol{A}^{(k-2)}=\boldsymbol{H}_{k-1}\cdots\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}\\&=\left[\boldsymbol{a}_1^{(k-1)},\boldsymbol{a}_2^{(k-1)},\cdots,\boldsymbol{a}_n^{(k-1)}\right],\qquad k=2,3,\cdots\end{aligned}$$

并且其前 $k-1$ 列具有以下变换结果：

$$\boldsymbol{a}_j^{(k-1)}=\left[a_{1j}^{(k-1)},\cdots,a_{jj}^{(k-1)},0,\cdots,0\right]^{\mathrm{T}},\qquad j=1,2,\cdots,k-1$$

因此，第 k 次 Householder 变换的目的就是保持前 $k-1$ 列不变，实现 $\boldsymbol{A}^{(k-1)}$ 的第 k 列的下述变换：

$$\tilde{\boldsymbol{H}}_k \begin{bmatrix} a_{k,k}^{(k-1)} \\ a_{k+1,k}^{(k-1)} \\ \vdots \\ a_{m,k}^{(k-1)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{k,k}^{(k)} \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

这相当于对矩阵 $\boldsymbol{A}^{(k-1)}$ 进行 Householder 变换 $\boldsymbol{H}_k\boldsymbol{A}^{(k-1)}$ 时取

$$\boldsymbol{H}_k = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_{k-1} & 0 \\ 0 & \tilde{\boldsymbol{H}}_k \end{bmatrix}$$

n 次 Householder 变换后，即可实现 QR 分解。

例 4.7.1　已知线性方程组

$$x_1 + 2x_2 = 5$$
$$2x_1 + 3x_2 = -2$$
$$6x_1 + 7x_2 = 1$$

用 Householder 变换求上述方程组的最小二乘解。

解　记增广矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 5 \\ 2 & 3 & 8 \\ 6 & 7 & 21 \end{bmatrix}$$

针对第 1 列 $[1,2,6]^{\mathrm{T}}$，由式 (4.7.13) 和式 (4.7.14) 求得 Householder 向量 $\boldsymbol{u}_1 = [1.075, 0.290, 0.871]^{\mathrm{T}}$。经过 Householder 矩阵 $\boldsymbol{H}_1 = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{T}}$ 变换后，得

$$\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -6.415 & -7.826 & -23.008 \\ 0 & 0.592 & 0.875 \\ 0 & 0.808 & 1.438 \end{bmatrix}$$

针对上述矩阵的第 2 列，计算 Householder 向量 $\boldsymbol{u}_2 = [0,\ 1.161,\ -0.809]^{\mathrm{T}}$。经过 Householder 变换 $\boldsymbol{H}_2 = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_2\boldsymbol{u}_2^{\mathrm{T}}$ 后，即得 QR 分解为

$$\boldsymbol{H}_2\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -6.415 & -7.826 & -23.008 \\ 0 & -1.105 & -1.851 \\ 0 & 0 & -0.160 \end{bmatrix}$$

由此得线性方程组

$$-6.415x_1 - 7.826x_2 = -23.008$$
$$-1.105x_2 = -1.851$$

用回代法解之，得 $x_2 = 1.675$ 和 $x_1 = 1.543$。将这两个解代入原方程，得三个方程的拟合误差分别为 $e_1 = 0.107$，$e_2 = 0.111$ 和 $e_3 = 0.017$。

如果矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的秩小于 n，则上述 Householder QR 分解不一定能够产生正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$。为了解决这个问题，Golub 与 Van Loan 提出使用带有列旋转的 Householder QR 分解算法 [184, p.235]。该算法计算分解

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Pi}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_{11} & \boldsymbol{R}_{12}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\tag{4.7.17}$$

式中，$\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵；$\boldsymbol{R}_{11}$ 为 $r\times r$ 上三角矩阵，且非奇异；$r=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$；矩阵 $\boldsymbol{\Pi}$ 为置换矩阵，矩阵乘积 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Pi}$ 表示对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列互换 (称为列旋转)。

列旋转 (column pivoting) 的原则是：在对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 列进行 Householder 变换之前，先比较 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 列至第 n 列中各列的范数，并把范数最大、且与第 k 列相距最近的列记为 $piv(k)$，然后将第 $piv(k)$ 列与第 k 列相互交换位置。这相当于第 k 次列旋转矩阵 $\boldsymbol{\Pi}_k$ 由 $n\times n$ 单位矩阵交换第 $piv(k)$ 和第 k 列而成。

算法 4.7.1 (具有列旋转的 Householder QR 分解算法)[184, p.235]

```
for j = 1 : n
  c(j) = A(1 : m, j)^T A(1 : m, j)
end
r = 0; τ = max{c(1), c(2), ··· , c(n)}
求满足 c(k) = τ 的最小整数 k
while τ > 0
  r = r + 1
  piv(r) = k :  A(1 : m, r) ↔ A(1 : m, k); c(r) ↔ c(k)
  v(r : m) = house(A(r : m, r))
  A(r : m, r : n) = row.house(A(r : m, r : n), v(r : m))
  A(r + 1 : m, r) = v(r + 1 : m)
  for i = r + 1 : n
      c(i) = c(i) − A(r, i)^2
  end
  if r < n
      τ = max{c(r + 1), c(r + 2), ··· , c(n)}
      在 k = r + 1, r + 2, ··· , n 中，求满足 c(k) = τ 的最小整数 k
  else
      τ = 0
  end
end
```

上述算法中，$v=\mathrm{house}(\boldsymbol{x})$ 代表针对向量 $\boldsymbol{x}$ 的 Householder 向量函数；而 $A=\mathrm{row.house}(A,v)$ 为 Householder 左乘函数，表示用 Householder 变换结果 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}=(\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}/\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v})\boldsymbol{A}$ 重写矩阵 $\boldsymbol{A}$。

具有列旋转的 Householder QR 分解在矩阵的奇异值分解与特征值分解中有着重要的应用。

虽然我们分别叙述了修正 Gram-Schmidt 法和 Householder 法两种 QR 分解方法，但是这两种方法在数学上是等价的。除了存在 $\boldsymbol{Q}$ 的第 j 列和 $\boldsymbol{R}$ 的第 j 行的符号可同时反转的自由度以外，修正 Gram-Schmidt 法和 Householder 法是相同的。

4.7.4 采用 Givens 旋转的 QR 分解

Givens 旋转也可以用来计算 QR 分解。这里以 4×3 矩阵为例，说明 Givens QR 分解的思想：

$$\begin{bmatrix}\times&\times&\times\\\times&\times&\times\\\otimes&\times&\times\\\otimes&\times&\times\end{bmatrix}\xrightarrow{(3,4)}\begin{bmatrix}\times&\times&\times\\\otimes&\times&\times\\\otimes&\times&\times\\0&\times&\times\end{bmatrix}\xrightarrow{(2,3)}\begin{bmatrix}\otimes&\times&\times\\\otimes&\times&\times\\0&\times&\times\\0&\times&\times\end{bmatrix}\xrightarrow{(1,2)}\begin{bmatrix}\times&\times&\times\\0&\times&\times\\0&\otimes&\times\\0&\otimes&\times\end{bmatrix}\xrightarrow{(3,4)}$$

$$\begin{bmatrix}\times&\times&\times\\0&\otimes&\times\\0&\otimes&\times\\0&0&\times\end{bmatrix}\xrightarrow{(2,3)}\begin{bmatrix}\times&\times&\times\\0&\times&\times\\0&0&\otimes\\0&0&\otimes\end{bmatrix}\xrightarrow{(3,4)}\begin{bmatrix}\times&\times&\times\\0&\times&\times\\0&0&\times\\0&0&0\end{bmatrix}$$

其中，$\otimes$ 表示用 Givens 旋转进行变换的元素。

从上述说明中易得出结论：如果令 $\boldsymbol{G}_j$ 代表约化过程中的第 j 次 Givens 旋转，则 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}$ 是上三角矩阵，其中，$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{G}_t\boldsymbol{G}_{t-1}\cdots\boldsymbol{G}_1$，而 t 是总的旋转次数。

例 4.7.2 用 Givens 旋转求例 4.7.1 所示线性方程的最小二乘解。

解 构造增广矩阵

$$\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}1&2&5\\2&3&8\\6&7&21\end{bmatrix}$$

先用 Givens 旋转消去 $\boldsymbol{X}$ 的 $(3,1)$ 元素 6。为此，选择 $c=-0.1663,\ s=0.9859$，则有

$$\boldsymbol{G}_{31}=\begin{bmatrix}-0.1663&0&-0.9859\\0&1&0\\0.9859&0&-0.1663\end{bmatrix}\rightarrow\boldsymbol{G}_{31}\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}-6.081&-7.234&-21.536\\2&3&8\\0&0.808&1.438\end{bmatrix}$$

为了消去 $\boldsymbol{G}_{31}\boldsymbol{X}$ 的 $(2,1)$ 元素 2，选择 $c=0.952,\ s=0.313$，故

$$\boldsymbol{G}_{21}=\begin{bmatrix}0.952&-0.313&0\\0.313&0.952&0\\0&0&1\end{bmatrix}\rightarrow\boldsymbol{G}_{21}\boldsymbol{G}_{31}\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}-6.415&-7.826&-23.008\\0&0.592&0.875\\0&0.808&1.438\end{bmatrix}$$

在 $\boldsymbol{G}_{32}$ 中选择 $c=-0.6527,\ s=0.890$，消去 $\boldsymbol{G}_{21}\boldsymbol{G}_{31}\boldsymbol{X}$ 中的 $(3,2)$ 元素，得 QR 分解

$$\boldsymbol{G}_{32}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&-0.6527&-0.8900\\0&0.8900&-0.6527\end{bmatrix}\rightarrow\boldsymbol{G}_{32}\boldsymbol{G}_{21}\boldsymbol{G}_{31}\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}-6.415&-7.826&-23.008\\0&-1.105&-1.851\\0&0&-0.160\end{bmatrix}$$

由此得线性方程组

$$-6.415x_1 - 7.826x_2 = -23.008$$
$$-1.105x_2 = -1.851$$

其解与例 4.7.1 的结果相同，也为 $x_1 = 1.543$ 和 $x_2 = 1.675$。

4.7.5 基于 QR 分解的参数估计问题

现在以系统辨识为例，说明如何利用矩阵的 QR 分解进行系统参数的递推估计。

令系统在 k 时刻的输入为 $x(k)$，系统输出的观测值由卷积方程

$$y(k) = x(k) * \theta_k + e(k) = \sum_{i=0}^{p} \theta_i x(k-i) + e(k) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta} + e(k) \tag{4.7.18}$$

给出，其中，$*$ 表示离散卷积，$e(k)$ 代表 k 时刻的观测误差，且

$$\boldsymbol{x}_k = [x(k), x(k-1), \cdots, x(k-p)]^{\mathrm{T}}$$
$$\boldsymbol{\theta} = [\theta_0, \theta_1, \cdots, \theta_p]^{\mathrm{T}}$$

若将 $k = 1, 2, \cdots, n$ 的所有观测数据组成一向量，则

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{A}_n\boldsymbol{\theta} + \boldsymbol{e}_n \tag{4.7.19}$$

式中，$\boldsymbol{y}_n = [y(1), y(2), \cdots, y(n)]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{e}_n = [e(1), e(2), \cdots, e(n)]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{A}_n = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n]^{\mathrm{T}}$。

系统辨识问题的提法是：已知系统输入 $x(k)$ 和输出观测值 $y(k)$，其中，$k = 1, 2, \cdots, n$，估计系统参数向量 $\boldsymbol{\theta}$。在时变系统的辨识中，则要求在已估计 n 时刻的系统参数向量 $\boldsymbol{\theta}_n$ 的情况下，使用增加的 $x(n+1), y(n+1)$ 值，通过简单的运算，递推出 $n+1$ 时刻的系统参数向量 $\boldsymbol{\theta}_{n+1}$。$n$ 时刻的系统辨识问题可以化为最小二乘问题

$$\min_{\boldsymbol{\theta}_n} \|\boldsymbol{A}_n\boldsymbol{\theta}_n - \boldsymbol{y}_n\|_2^2 \tag{4.7.20}$$

求解，并且其解由“法方程”

$$\boldsymbol{A}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_n\boldsymbol{\theta}_n = \boldsymbol{A}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_n \quad 或 \quad \boldsymbol{R}_{xx}\boldsymbol{\theta}_n = \boldsymbol{r}_n \tag{4.7.21}$$

确定。式中，$\boldsymbol{R}_{xx} = \boldsymbol{A}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_n$ 代表系统输入 $x(k)$ 的协方差矩阵，$\boldsymbol{r}_n = \boldsymbol{A}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_n$。

直接求解式 (4.7.21) 的方法叫做协方差方法。例如，先计算协方差矩阵 $\boldsymbol{R}_{xx}$ 的 Cholesky 分解 $\boldsymbol{R}_{xx} = \boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}$，然后利用回代法解三角矩阵方程 $\boldsymbol{G}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta}_n = \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{r}_n$ 直接得到 $\boldsymbol{\theta}_n$。然而，由于 $\boldsymbol{R}_{xx} = \boldsymbol{A}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_n$ 的条件数是 $\boldsymbol{A}_n$ 的条件数的平方，因此，直接计算式 (4.7.21) 得到的解有可能是严重病态的 (即条件数很大)，即使 $\boldsymbol{A}_n$ 本身的条件数并不大，不是严重病态的。

在系统参数向量 $\boldsymbol{\theta}$ 的自适应递推辨识中，标准的递推最小二乘 (RLS) 法和 $\mathrm{U^TDU}$ 分解法 [43] 都是针对协方差矩阵 $\boldsymbol{R}_{xx}$ 进行更新的。虽然 $\mathrm{U^TDU}$ 分解 (其中，$\boldsymbol{U}$ 为上三角

矩阵，$\boldsymbol{D}$ 为对角矩阵) 在数值上比较稳定，但是这些递推辨识方法也同样存在条件数变大的毛病。

相比之下，$\boldsymbol{A}_n$ 的 QR 分解可以保持原问题的条件数不变。不妨令

$$\boldsymbol{Q}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_n = \begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix} \tag{4.7.22}$$

式中，$\boldsymbol{Q}_n$ 是 $n\times n$ 正交矩阵，$\boldsymbol{R}_n$ 是 $(p+1)\times(p+1)$ 上三角矩阵，而 $\boldsymbol{O}$ 为 $(n-p-1)\times(p+1)$ 维零矩阵。

由于正交变换可以保持被变换的向量的 Euclidean 长度或范数不变，所以式 (4.7.20) 的最小二乘问题可等价写作

$$\min_{\boldsymbol{\theta}_n}\left\|\boldsymbol{Q}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_n\boldsymbol{\theta}_n - \boldsymbol{Q}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_n\right\|_2^2 \tag{4.7.23}$$

或

$$\min_{\boldsymbol{\theta}_n}\|\boldsymbol{R}_n\boldsymbol{\theta}_n - \bar{\boldsymbol{y}}_n\|_2^2 + \|\tilde{\boldsymbol{y}}_n\|_2^2 \tag{4.7.24}$$

式中

$$\boldsymbol{Q}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_n = \begin{bmatrix}\bar{\boldsymbol{y}}_n\\ \tilde{\boldsymbol{y}}_n\end{bmatrix} \tag{4.7.25}$$

且 $\bar{\boldsymbol{y}}_n$ 为 $(p+1)\times 1$ 向量，$\tilde{\boldsymbol{y}}_n$ 为 $(n-p-1)\times 1$ 向量，它们可以从 $\boldsymbol{Q}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_n$ 直接分块得到。

一旦获得了 $\bar{\boldsymbol{y}}_n$，即可由 $\boldsymbol{R}_n\boldsymbol{\theta}_n = \bar{\boldsymbol{y}}_n$ 得到 $\boldsymbol{\theta}$。解此方程需要 $n(n+1)/2$ 次运算，并且最小残差值等于 $\|\tilde{\boldsymbol{y}}_n\|_2^2$。

假定增加了两个已知数值 $x(n+1)$ 和 $y(n+1)$，我们来讨论如何更新系统参数的估计，即使用已估计的参数向量 $\boldsymbol{\theta}_n$ 和简单的运算，得到 $n+1$ 时刻的新估计 $\boldsymbol{\theta}_{n+1}$。为了减小过去数据对参数估计的影响，对数据 $x(k)$ 和 $y(k)$ 采用指数加权，即 $n+1$ 时刻的数据矩阵和观测数据向量分别取作

$$\boldsymbol{A}_{n+1} = \begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{A}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{y}_{n+1} = \begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{y}_n\\ y(n+1)\end{bmatrix} \tag{4.7.26}$$

式中，$0\leqslant\lambda<1$ 称为遗忘因子，且 $\boldsymbol{x}_{n+1} = [x(n+1), x(n), \cdots, x(n-p)]^{\mathrm{T}}$。于是，可以写出式 (4.7.20) 在 $(n+1)$ 时刻的形式为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\theta}_{n+1} &= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}}\left\|\boldsymbol{A}_{n+1}\boldsymbol{\theta} - \boldsymbol{y}_{n+1}\right\|_2^2\\ &= \arg\min_{\boldsymbol{\theta}}\left\|\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{A}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\boldsymbol{\theta} - \begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{y}_n\\ y(n+1)\end{bmatrix}\right\|_2^2\end{aligned} \tag{4.7.27}$$

乍一看，上式似乎没有什么特别吸引人之处，其实不然。这是因为，如同下面的引理所述，式 (4.7.27) 的极小化变量等价为下述式 (4.7.28) 的极小化变量，而后者非常适合于递推更新。

引理 4.7.2[49] 若 $\boldsymbol{A}_n=\boldsymbol{Q}_n\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$，$\boldsymbol{Q}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_n=\begin{bmatrix}\bar{\boldsymbol{y}}_n\\ \tilde{\boldsymbol{y}}_n\end{bmatrix}$，其中，$\boldsymbol{Q}_n$ 是正交矩阵，$\boldsymbol{R}_n$ 是上三角矩阵，则式 (4.7.27) 的极小化变量等同于下式的极小化变量：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\theta}_{n+1}&=\arg\min_{\boldsymbol{\theta}}\left\|\boldsymbol{A}_{n+1}\boldsymbol{\theta}-\boldsymbol{y}_{n+1}\right\|_2^2\\&=\arg\min_{\boldsymbol{\theta}}\left\|\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\boldsymbol{\theta}-\begin{bmatrix}\lambda\bar{\boldsymbol{y}}_n\\ y(n+1)\end{bmatrix}\right\|_2^2\end{aligned}\tag{4.7.28}$$

证明 记

$$\boldsymbol{A}_{n+1}=\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{A}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix},\qquad\bar{\boldsymbol{R}}=\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}$$

则有

$$\boldsymbol{A}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_{n+1}=\lambda^2\boldsymbol{A}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_n+\boldsymbol{x}_{n+1}\boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}=\lambda^2\boldsymbol{R}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_n+\boldsymbol{x}_{n+1}\boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}=\bar{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{R}}$$

以及

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}_{n+1}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{y}_n\\ y(k+1)\end{bmatrix}&=\lambda^2\boldsymbol{A}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_n+\boldsymbol{x}_{n+1}y(n+1)\\&=\lambda^2\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_n+\boldsymbol{x}_{n+1}y(n+1)\\&=\lambda^2\boldsymbol{R}_n^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{y}}_n+\boldsymbol{x}_{n+1}y(n+1)\\&=\bar{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda\bar{\boldsymbol{y}}_n\\ y(n+1)\end{bmatrix}\end{aligned}$$

或写作 $\boldsymbol{A}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{n+1}=\bar{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{n+1}$。注意到式 (4.7.27) 是法方程 $\boldsymbol{A}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_{n+1}\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{A}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{n+1}$ 的最小二乘问题的表示，而式 (4.7.28) 是法方程 $\bar{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{\theta}=\bar{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{n+1}$ 的最小二乘问题的表示。由结果 $\boldsymbol{A}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_{n+1}=\bar{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{R}}$ 和 $\boldsymbol{A}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{n+1}=\bar{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{n+1}$ 立即知，法方程 $\boldsymbol{A}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_{n+1}\boldsymbol{\theta}=\boldsymbol{A}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{n+1}$ 和 $\bar{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{\theta}=\bar{\boldsymbol{R}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{n+1}$ 等价，这就证明了本引理。 ■

如果将式 (4.7.28) 的极小化变量记作 $\boldsymbol{\theta}_{n+1}$，则以上讨论可总结为 $\boldsymbol{\theta}_{n+1}$ 的自适应递推估计算法如下。

算法 4.7.2 (系统参数的自适应估计算法)

步骤 1 对矩阵 $\bar{\boldsymbol{R}}=\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}$ 进行 QR 分解，得

$$\boldsymbol{Q}_{n+1}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{Q}_{n+1}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_{n+1}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\tag{4.7.29}$$

式中，$\boldsymbol{Q}_{n+1}$ 是 $(n+1)\times(n+1)$ 正交矩阵，$\boldsymbol{R}_{n+1}$ 为 $(p+1)\times(p+1)$ 上三角矩阵，且 $\boldsymbol{O}$ 是 $(n-p)\times(p+1)$ 零矩阵。

步骤 2 进行分块运算

$$\boldsymbol{Q}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}_{n+1}=\begin{bmatrix}\bar{\boldsymbol{y}}_{n+1}\\ \tilde{\boldsymbol{y}}_{n+1}\end{bmatrix}$$

其中，$\bar{\boldsymbol{y}}_{n+1}$ 为 $(p+1)\times 1$ 向量，$\tilde{\boldsymbol{y}}_{n+1}$ 为 $(n-p)\times 1$ 向量。

步骤 3 求解三角矩阵方程 $\boldsymbol{R}_{n+1}\boldsymbol{\theta}_{n+1}=\bar{\boldsymbol{y}}_{n+1}$ 得到 $\boldsymbol{\theta}_{n+1}$。

4.7.6 基于 Householder 变换的快速时变参数估计

考查 $n \times (p+1)$ 矩阵

$$\boldsymbol{A}_n = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1,p+1} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2,p+1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,p+1} \end{bmatrix}$$

的 Householder QR 分解，即

$$\boldsymbol{H}_n\boldsymbol{A}_n = \begin{bmatrix} a_{11}^* & a_{12}^* & \cdots & a_{1,p+1}^* \\ 0 & a_{22}^* & \cdots & a_{2,p+1}^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & a_{p+1,p+1}^* \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{4.7.30}$$

显然，只需要进行 p 次 Houscholder 变换即可。换言之，为了得到上述 QR 分解，应该选择 $\boldsymbol{H}_n$ 为 p 个 Householder 变换矩阵之积 [202]，即

$$\boldsymbol{H}_n = \boldsymbol{H}_n(p)\boldsymbol{H}_n(p-1)\cdots\boldsymbol{H}_n(1) \tag{4.7.31}$$

式中

$$\boldsymbol{H}_n(j) = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{u}_j\boldsymbol{u}_j^{\mathrm{T}}/\sigma_j, \quad j = 1,2,\cdots,p \tag{4.7.32}$$

是对矩阵 $\boldsymbol{A}_n^{(j)} = \boldsymbol{H}_n(j-1)\boldsymbol{H}_n(2)\boldsymbol{H}_n(1)\boldsymbol{A}_n$ 第 j 列向量 $[a_{1j}^{(j)}, a_{2j}^{(j)}, \cdots, a_{nj}^{(j)}]^{\mathrm{T}}$ 进行的 Householder 变换矩阵，其参数选择方法为 [477]

$$\left.\begin{aligned} \alpha_j &= \sqrt{\sum_{i=j}^{n}\left[a_{ij}^{(j)}\right]^2} \\ \sigma_j &= \alpha_j\left(\alpha_j + |a_{jj}^{(j)}|\right) \\ \boldsymbol{u}_j(i) &= \begin{cases} 0, & i < j \\ a_{jj}^{(j)} + \mathrm{sgn}\left(a_{jj}^{(j)}\right)\alpha_j, & j = i \\ a_{ij}^{(j)}, & i > j \end{cases} \end{aligned}\right\}, \qquad j = 1,2,\cdots,p \tag{4.7.33}$$

其中

$$\boldsymbol{A}_n^{(j+1)} = \boldsymbol{A}_n^{(j)} - \boldsymbol{u}_j\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}} \tag{4.7.34}$$

并且

$$\boldsymbol{q}_j^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{u}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_n^{(j)}/\sigma_j \tag{4.7.35}$$

递推的 Householder QR 分解算法 [281] 如下：

$$
\begin{aligned}
&\text{for } j = 1 : p \\
&\quad \alpha_j = \sqrt{(a_{jj}^{(j)})^2 + (a_{p+2,j}^{(j)})^2}; \\
&\quad \sigma_j = \alpha_j(\alpha_j + |a_{jj}^{(j)}|); \\
&\quad \eta_j = a_{jj}^{(j)} + \text{sgn}(a_{jj}^{(j)})\alpha_j;; \\
&\quad \eta_j' = \eta_j/\sigma_j; \\
&\quad \mu_j' = a_{p+2,j}^{(j)}/\sigma_j; \\
&\quad \text{for } k = j : p+1; \\
&\quad\quad \tau_k = \eta_j a_{jk}^{(j)} + a_{p+2,j}^{(j)} a_{p+2,k}^{(j)}; \\
&\quad\quad a_{jk}^{(j+1)} = a_{jk}^{(j)} - \eta_j' \tau_k; \\
&\quad\quad a_{p+2,k}^{(j+1)} = a_{p+2,k}^{(j)} - \mu_j' \tau_k; \\
&\quad \text{end} \\
&\text{end}
\end{aligned}
$$

基于 QR 分解的自适应参数估计算法 [92]~[94],[283],[387] 一般由两个分开的过程组成：(1) 递推更新 QR 分解 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}$ 中的上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$；(2) 用回代法求解三角矩阵方程。由于直接的回代需要 $O(m^2)$ 次运算 (m 为数据长度)，因此，即便 Householder 变换再快速，整个自适应算法也至少需要 $O(m^2)$ 次运算。文献 [281] 将上述快速 Householder QR 分解算法和求解三角矩阵方程的回代法综合起来考虑，提出了只具有 $O(m)$ 复杂度的快速自适应算法，具体如下所述。

算法 4.7.3 (基于 Householder QR 分解的快速自适应参数估计算法)[281]

步骤 1 初始化

$$n = 0, \theta = \theta_0,\ s = \theta,\ f = [1, \cdots, 1]^{\mathrm{T}};$$

步骤 2 计算

$$f = wf,\ f' = -ws,\ f'' = \psi_n;$$

步骤 3 Householder 变换

$$
\begin{aligned}
&\Pi = 1,\ \Pi' = f_{m+1,1}; \\
&\text{for } i = 1 : m \\
&\quad \Pi'' = \Pi'^2,\ \alpha = \sqrt{f_{ii}^2 + \Pi''}; \\
&\quad \sigma = \alpha(\alpha + |f_{ii}|),\ \rho = 1 - \Pi''/\sigma; \\
&\quad \eta = f_{ii} + \text{sgn}(f_{ii})\alpha,\ \delta_i = -\text{sgn}(f_{ii})\Pi\Pi'/\alpha; \\
&\quad f_{ii} = -\text{sgn}(f_{ii})\alpha,\ \tau = (\eta f_{i,m+1} + \Pi' f_{m+1,m+1})/\sigma; \\
&\quad f_{i,m+1} = f_{i,m+1} - \eta\tau, f_{m+1,m+1} = f_{m+1,m+1} - \Pi'\tau; \\
&\quad \Pi = \Pi\rho,\ \Pi' = \Pi f_{m+1,i+1}; \\
&\text{end}
\end{aligned}
$$

步骤 4 回代

$\gamma = 0$; $s_m = -f_{m,m+1}$, $\theta_m = s_m/f_{m,m}$;

for $i = m-1:-1:1$

$\gamma = \gamma + f_{m+1,i+1}\theta_{i+1}$;

$s_i = -f_{i,m+1} - \delta_i\gamma$, $\theta_i = s_i/f_{ii}$;

end

步骤 5 若 T.Flag = True，则停止。否则，返回步骤 2，并执行以上步骤，直至 T.Flag = True。其中，T.Flag 是程序的终止标志。

4.7.7 基于 Givens 旋转的时变参数估计

现在考虑另外一种递推方法：递推求解 $\boldsymbol{\theta}_n$ 的变化量 $\boldsymbol{\delta}_n$，而不是直接递推求 $\boldsymbol{\theta}_{n+1}$ 本身。换句话说，令

$$\boldsymbol{\theta}_{n+1} = \boldsymbol{\theta}_n + \boldsymbol{\delta}_n \tag{4.7.36}$$

问题是如何更新 $\boldsymbol{\delta}_n$。

假定正交矩阵 $\tilde{\boldsymbol{Q}}$ 为已知，它满足

$$\tilde{\boldsymbol{Q}}\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_{n+1}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix} \tag{4.7.37}$$

由式 (4.7.28)，式 (4.7.36) 和式 (4.7.37) 易知，$\boldsymbol{\delta}_n$ 是下式的极小化变量：

$$\boldsymbol{\delta}_n = \arg\min_{\boldsymbol{\delta}_n}\left\|\tilde{\boldsymbol{Q}}\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\boldsymbol{\delta}_n - \tilde{\boldsymbol{Q}}\left\{\begin{bmatrix}\lambda\bar{\boldsymbol{y}}_n\\ y(n+1)\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{R}_n\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\boldsymbol{\theta}_n\right\}\right\|$$

此式又可简化为

$$\boldsymbol{\delta}_n = \arg\min_{\boldsymbol{\delta}_n}\left\|\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_{n+1}\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix}\boldsymbol{\delta}_n - \tilde{\boldsymbol{Q}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{0}\\ u(n+1)\end{bmatrix}\right\|. \tag{4.7.38}$$

式中，$u(n+1) = y(n+1) - \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta}_n$。因此，$\boldsymbol{\delta}_n$ 可以从三角矩阵方程

$$\boldsymbol{R}_{n+1}\boldsymbol{\delta}_n = \bar{\boldsymbol{y}}_{n+1} \tag{4.7.39}$$

解出，其中，$\bar{\boldsymbol{y}}_{k+1}$ 满足

$$\begin{bmatrix}\bar{\boldsymbol{y}}_{n+1}\\ r(n+1)\end{bmatrix} = \tilde{\boldsymbol{Q}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{0}\\ u(n+1)\end{bmatrix} \tag{4.7.40}$$

为了求出满足式 (4.7.37) 的 $\tilde{\boldsymbol{Q}}$，可以使用 Givens 平面旋转进行清零，将式 (4.7.37) 中的行向量 $\boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}}$ 的全部元素变成零。由于 $\tilde{\boldsymbol{Q}}$ 必须左乘式 (4.7.40)，所以对增广的矩阵

$$\begin{bmatrix}\lambda\boldsymbol{R}_n & \boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{x}_{n+1}^{\mathrm{T}} & u(n+1)\end{bmatrix} \tag{4.7.41}$$

执行所需要的清零。综合以上分析，在每一步递推更新中需要的步骤如下：

(1) 计算预测误差 $y_{k+1}-\phi_{k+1}^T\theta_k$ (子程序“lspr”);

(2) 形成式 (4.7.41) 中的 $(n+1)\times(n+1)$ 矩阵 (子程序“newqr”);

(3) 利用一系列 Givens 旋转将上述矩阵最底一行的左边 n 个元素扫除为零 (子程序“sweep”和“givens”);

(4) 解上三角矩阵方程 (4.7.39) 得到 δ_k (子程序“solve”)。

利用 Givens 旋转求解方程 $\boldsymbol{A\theta}=\boldsymbol{y}$ 的递推最小二乘算法的 MATLAB 程序如下 [49]:

```
function X = lspr(A, y, λ)
[m, n] = size(A); x = zeros(n, 1); dx = zeros(n, 1);
  for k = 1 : m
    φ = A(k, :)'; e = y(k) − φ' ∗ x;
    [R, yb] = newqr(R, φ, e, λ); dx = solve(R, yb);
    x = x + dx; X(k, :) = x';
  end
function [R, yb] = newqr(R, φ, e, λ)
[m, n] = size(R); BigR = [R   zeros(n, 1); φ'   e];
  for i = 1 : n
    BigR = sweep(BigR, i, λ);
  end
R = BigR(1 : n, 1 : n); yb = BigR(1 : n, n + 1);
function A = sweep(A, i, λ)
[m, n] = size(A); [c, s] = givens(A(i, i) ∗ λ, A(n, i));
A(i, i) = r; A(n, i) = 0.0; clam = c ∗ λ; slam = s ∗ λ;
  for k = i + 1 : n
    a = A(i, k) ∗ clam + A(n, k) ∗ s;
    A(n, k) = −A(i, k) ∗ slam + A(n, k) ∗ c; A(i, k) = a;
  end
function x = solve(R, b)
[m, n] = size(R);
  for k = n : −1 : 1
    sum = 0.0;
      for j = k + 1 : n
        sum = sum + R(k, j) ∗ x(j, 1);
      end
    x(k, 1) = (b(k) − sum)/R(k, k);
  end
```

上述算法中，同时对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和向量 $\boldsymbol{y}$ 应用 Givens 旋转，因此无需存储正交矩阵 $\tilde{\boldsymbol{Q}}$。

4.8 三角 − 对角化分解

本节讨论矩阵的另一种分解，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解为三个矩阵的乘积，三个矩阵中两个为三角矩阵，一个为对角矩阵。先介绍 LDM^T 和 LDL^T 两种分解。其中，LDM^T 分解可以看作是 LU 分解的一种变型，而 LDL^T 分解则是 LDM^T 分解在对称矩阵情况下面的一个特例。

4.8.1 LDM^T 和 LDL^T 分解

定理 4.8.1 (LDM^T 分解) 若 $\boldsymbol{A} \in R^{n\times n}$ 的所有子矩阵都是非奇异的，则存在两个唯一的单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{M}$ 以及一个唯一的对角矩阵 $\boldsymbol{D} = \text{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$ 使得 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LDM}^\text{T}$。

证明 由定理 4.6.2 知，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 LU 分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU}$。令 $\boldsymbol{D} = \text{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$，其中，$d_i = u_{ii}, i = 1, 2, \cdots, n$。注意到 $\boldsymbol{D}$ 是非奇异的，并且 $\boldsymbol{M}^\text{T} = \boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}$ 是单位上三角矩阵，因此 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LU} = \boldsymbol{LD}(\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{U}) = \boldsymbol{LDM}^\text{T}$。分解的唯一性可以从定理 4.6.2 所述 LU 分解的唯一性得到。 ■

上面的证明表明，矩阵的 LDM^T 分解可以利用 LU 分解得出。下面介绍三个矩阵 $\boldsymbol{L}$, $\boldsymbol{D}$ 和 $\boldsymbol{M}$ 的直接计算方法。

假定矩阵 $\boldsymbol{L}$ 的前 $j-1$ 列、对角矩阵 $\boldsymbol{D}$ 的对角线元素 $d_1, d_2, \cdots, d_{j-1}$ 以及矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的前 $j-1$ 行均为已知 (其中，$1 \leqslant j \leqslant n$)。为了找到计算 $\boldsymbol{L}(j+1:n, j)$, $\boldsymbol{M}(j, j-1)$ 和 d_j 的诀窍，令 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LDM}^\text{T}$ 两边的第 j 列相等。特别地，有

$$\boldsymbol{A}(1:n, j) = \boldsymbol{Lv} \tag{4.8.1}$$

式中，$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{DM}^\text{T}\boldsymbol{e}_j$。式 (4.8.1) 的上半部分定义 $\boldsymbol{v}(1:j)$ 为下三角矩阵方程

$$\boldsymbol{L}(1:j, 1:j)\boldsymbol{v}(1:j) = \boldsymbol{A}(1:j, j) \tag{4.8.2}$$

的解，下半部分则给出方程

$$\boldsymbol{L}(j+1:n, 1:j)\boldsymbol{v}(1:j) = \boldsymbol{A}(j+1:n, j)$$

它又可以改写作

$$\boldsymbol{L}(j+1:n, 1:j)\boldsymbol{v}(j) = \boldsymbol{A}(j+1:n, j) - \boldsymbol{L}(j+1:n, 1:j-1)\boldsymbol{v}(1:j-1) \tag{4.8.3}$$

一旦从式 (4.8.2) 解出 $\boldsymbol{v}$，即可求出

$$\begin{aligned} d(j) &= v(j) \\ m(j,i) &= v(i)/d(i), \qquad i = 1, 2, \cdots, j-1 \end{aligned}$$

然后，又可以从式 (4.8.3) 解出 $\boldsymbol{L}$ 的第 j 列。具体算法如下 [184]。

算法 4.8.1 ($\mathrm{LDM^T}$ 分解) 若 $\boldsymbol{A} \in R^{n\times n}$ 存在 LU 分解，则下面的算法计算单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和 $\boldsymbol{M}$ 以及对角矩阵 $\boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$，并使得 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LDM}^{\mathrm{T}}$。作为输出结果，$a_{ij}$ 分别存放 $l_{ij}(i > j)$，$d_j(i = j)$ 和 $m_{ji}(i < j)$。

for $j = 1 : n$

  求解 $L(1:j, 1:j)v(1:j) = A(1:j, j)$

   $v(1:j) = A(1:j, j)$;

   for $k = 1 : j-1$

     $v(k+1:j) = v(k+1:j) - v(k)A(k+1:j, k)$;

   end

  计算 $M(j, 1:j-1)$，并存储在 $A(1:j-1, j)$

   for $i = 1 : j-1$

     $A(i, j) = v(i)/A(i, i)$;

   end

  存储 $d(j)$ 在 $A(j, j)$

   $A(j, j) = v(j)$;

  计算 $L(j+1:n, j)$，存储在 $A(j+1:n, j)$

   for $k = 1 : j-1$

     $A(j+1:n, j) = A(j+1:n, j) - v(k)A(j+1:n, k)$;

   end

   $A(j+1:n, j) = A(j+1:n, j)/v(j)$;

end

如果 $\boldsymbol{A}$ 是对称矩阵，则 $\mathrm{LDM^T}$ 分解简化为 $\mathrm{LDL^T}$ 分解。

定理 4.8.2 若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{LDM}^{\mathrm{T}}$ 是非奇异的对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 $\mathrm{LDM^T}$ 分解，则 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{M}$。

证明 矩阵 $\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{M}^{-\mathrm{T}} = \boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{L}\boldsymbol{D}$ 既是对称的，又是下三角的，因此是对角矩阵。由于 $\boldsymbol{D}$ 是非奇异的，所以这意味着 $\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{L}$ 也是对角的。但是，$\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{L}$ 是单位下三角的，所以 $\boldsymbol{M}^{-1}\boldsymbol{L} = \boldsymbol{I}$。 ■

4.8.2 Schur 分解

利用相似变换，能够把一个给定的矩阵简化为几种标准型之一。从数值稳定性考虑，利用酉矩阵的相似变换自然是最有吸引力的。

引理 4.8.1 若 $\boldsymbol{A} \in C^{n\times n}$, $\boldsymbol{B} \in C^{p\times p}$ 和 $\boldsymbol{X} \in C^{n\times p}$ 满足条件

$$\boldsymbol{AX} = \boldsymbol{XB}, \qquad \mathrm{rank}(\boldsymbol{X}) = p \tag{4.8.4}$$

则存在一酉矩阵 $U \in C^{n\times n}$ 使得

$$U^{\mathrm{H}}AU = T = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ O & T_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} p \\ n-p \end{matrix} \tag{4.8.5}$$
$$\quad p \quad n-p$$

其中，$\lambda(T_{11}) = \lambda(A) \cap \lambda(B)$。

证明 设

$$Tx = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ O & T_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

其中，$x_1 \in C^{p\times 1}$，$x_2 \in C^{(n-p)\times 1}$。如果 $x_2 \neq 0$，则 $T_{22}x_2 = \lambda x_2$，因此 $\lambda \in \lambda(T_{22})$。若 $x_2 = 0$，则 $T_{11}x_1 = \lambda x_1$，从而 $\lambda \in \lambda(T_{11})$。于是，$\lambda(T) \in \lambda(T_{11}) \cup \lambda(T_{22})$。但是，由于 $\lambda(T)$ 和 $\lambda(T_{11}) \cup \lambda(T_{22})$ 二者具有相同的基数性，所以它们相等，即

$$\lambda(T) = \lambda(T_{11}) \cup \lambda(T_{22}) \tag{4.8.6}$$

另外一方面，令

$$X = U \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix}, \qquad U \in C^{m\times n},\ R \in R^{p\times p}$$

是 X 的 QR 分解，将此式代入式 (4.8.4)，并予以重排，便得到

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} B$$

其中

$$U^{\mathrm{H}}AU = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix}$$

利用 R 的非奇异性以及等式 $T_{21}R = O$，$T_{11}R = RB$，可以得出结论：$T_{21} = O$ 和 $\lambda(T_{11}) = \lambda(B)$。又由式 (4.8.6) 有 $\lambda(A) = \lambda(T) = \lambda(T_{11}) \cup \lambda(T_{22})$。综合这两个结论即得 $\lambda(T_{11}) = \lambda(A) \cap \lambda(B)$。 ■

Schur 于 1909 年提出的矩阵分解 [409] 是一种典型的酉相似变换，而且利用引理 4.8.1 可以证明 Schur 分解的下述性质。

定理 4.8.3 (Schur 分解) 若 $A \in C^{n\times n}$，则存在一个酉矩阵 $U \in C^{n\times n}$ 使得

$$U^{\mathrm{H}}AU = T = D + N \tag{4.8.7}$$

其中，$D = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$；$N$ 是严格上三角矩阵，即 $n_{ij} = 0, \forall i \geqslant j$。

证明 使用数学归纳法。当 $n = 1$ 时，定理显然成立。假定定理对 $n-1$ 阶成立。若 $Ax = \lambda x$ (其中，$x \neq 0$)，则由引理 4.8.1 (令矩阵 B 为标量 λ) 知，存在一个酉矩阵 $\bar{U}^{\mathrm{H}}A\bar{U}$ 满足

$$\bar{U}^{\mathrm{H}}A\bar{U} = \begin{bmatrix} \lambda & w^{\mathrm{H}} \\ 0 & C \end{bmatrix} \begin{matrix} 1 \\ n-1 \end{matrix} \tag{4.8.8}$$
$$1 \quad n-1$$

由数学归纳法知，存在酉矩阵 $\tilde{U}$ 使得 $\tilde{U}^{\mathrm{H}}C\tilde{U}$ 是上三角矩阵。因此，若 $U = \bar{U}\mathrm{diag}(1,\tilde{U})$，则 $U^{\mathrm{H}}AU$ 是上三角矩阵。 ■

若 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n]$ 是酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的列分块，则 $\boldsymbol{u}_i$ 称为 Schur 向量。令 $\boldsymbol{AU} = \boldsymbol{UT}$ 两边的列向量相等，由式 (4.8.7) 即可看到 Schur 向量满足关系式：

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_k = \lambda_k \boldsymbol{u}_k + \sum_{i=1}^{k-1} n_{ik}\boldsymbol{u}_i\,, \qquad k = 1, 2, \cdots, n \tag{4.8.9}$$

由此得出结论：子空间

$$S_k = \mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_k\}\,, \qquad k = 1, 2, \cdots, n \tag{4.8.10}$$

是不变的。

假定已知 $\boldsymbol{A} \in C^{n\times n}$ 和一个酉矩阵 $\boldsymbol{U}_0 \in C^{n\times n}$。矩阵变换

$\boldsymbol{T}_0 = \boldsymbol{U}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}_0$

for $k = 1, 2, \cdots$

  $\boldsymbol{T}_{k-1} = \boldsymbol{U}_k\boldsymbol{R}_k$ (QR 分解)

  $\boldsymbol{T}_k = \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{U}_k$

end

称为 QR 迭代，它是计算 Schur 分解最有效的方法。

由于 $\boldsymbol{T}_k = \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{U}_k = \boldsymbol{U}_k^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{U}_k\boldsymbol{R}_k)\boldsymbol{U}_k = \boldsymbol{U}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}_{k-1}\boldsymbol{U}_k$，所以由归纳法知

$$\boldsymbol{T}_k = (\boldsymbol{U}_0\boldsymbol{U}_1\cdots\boldsymbol{U}_k)^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{U}_0\boldsymbol{U}_1\cdots\boldsymbol{U}_k) \tag{4.8.11}$$

因此，每一个 $\boldsymbol{T}_k$ 与 $\boldsymbol{A}$ 是酉相似的。这表明，$\boldsymbol{T}_k$ 几乎总是收敛为上三角矩阵。即是说，式 (4.8.11) 几乎总是“收敛”为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Schur 分解。

除了式 (4.8.2) 的 QR 迭代外，还有几种常用的迭代方法 —— 乘幂迭代和正交迭代等，对此有兴趣的读者可参阅文献 [184, pp.351~357]。

定理 4.8.4 (实 Schur 分解)　若 $\boldsymbol{A} \in R^{n\times n}$，则存在一正交矩阵 $\boldsymbol{Q} \in R^{n\times n}$ 使得

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_{11} & \boldsymbol{R}_{12} & \cdots & \boldsymbol{R}_{1m} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{R}_{22} & \cdots & \boldsymbol{R}_{2m} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \cdots & \boldsymbol{R}_{mm} \end{bmatrix} \tag{4.8.12}$$

其中，$\boldsymbol{R}_{ii}$ 是具有复共轭特征值的 1×1 矩阵或 2×2 矩阵。

证明　见文献 [184]。

一旦实值 Schur 分解 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{T}$ 计算出来后，即可求出对应的特征向量。

令 $\boldsymbol{q}^{(0)} \in C^n$ 是给定的向量，具有单位 2 范数，并假定 $\boldsymbol{A} - \mu\boldsymbol{I} \in R^{n\times n}$ 非奇异。下

面的算法称作逆迭代 (inverse iteration)：

$$
\begin{aligned}
&\text{for } k = 1,2,\cdots \\
&\quad \text{求解}(\boldsymbol{A} - \mu \boldsymbol{I})\boldsymbol{z}^{(k)} = \boldsymbol{q}^{(k-1)} \\
&\quad \boldsymbol{q}^{(k)} = \boldsymbol{z}^{(k)}/\|\boldsymbol{z}^{(k)}\|_2 \\
&\quad \lambda^{(k)} = [\boldsymbol{q}^{(k)}]^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{q}^{(k)} \\
&\text{end}
\end{aligned}
$$

逆迭代法就是对 $(\boldsymbol{A} - \mu \boldsymbol{I})^{-1}$ 应用的乘幂迭代方法。

逆迭代可以和 QR 算法一起使用，以求出特征值和相应的特征向量：

(1) 计算 Hessenberg 分解 $\boldsymbol{U}_0^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{U}_0 = \boldsymbol{H}$；

(2) 对 $\boldsymbol{H}$ 应用 QR 迭代；

(3) 设经过 QR 迭代已计算出特征值 λ，令 $\mu = \lambda$，并应用逆迭代产生满足 $\boldsymbol{H}\boldsymbol{z} \approx \mu \boldsymbol{z}$ 的向量 $\boldsymbol{z}$；

(4) 计算 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{U}_0 \boldsymbol{z}$，得到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ 对应的特征向量 $\boldsymbol{u}$。

对于实对称矩阵，有下面的对称实 Schur 分解。

定理 4.8.5 (对称实 Schur 分解) 若 $\boldsymbol{A}$ 是一个实的 $n \times n$ 对称矩阵，则存在一个实的正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 满足

$$
\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{Q} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)
$$

证明 令 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{Q} = \boldsymbol{T}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的实值 Schur 分解。因为 $\boldsymbol{T}$ 也是对称的，所以 $\boldsymbol{T}$ 必定是 1×1 矩阵和 2×2 矩阵的直和。然而，容易验证，2×2 对称矩阵不可能有复值的特征值，故 $\boldsymbol{T}$ 在其对角线上不可能有 2×2 子矩阵块。 ■

求实对称矩阵的特征值的实际算法常采用对称 QR 分解，详见下节。

4.9 三对角化分解

4.8 节叙述的 QR 分解是针对一般矩阵的。下面我们将会看到，对称矩阵的 QR 分解能够进一步简化。简化的基本思想是先将对称矩阵三对角化，然后再对三对角矩阵进行对角化。

1. Householder 三对角化分解

假定 Householder 矩阵 $\boldsymbol{H}_1, \boldsymbol{H}_2, \cdots, \boldsymbol{H}_{k-1}$ 已经确定，并已使得

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{A}_{k-1} &= (\boldsymbol{H}_1 \boldsymbol{H}_2 \cdots \boldsymbol{H}_{k-1})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} (\boldsymbol{H}_1 \boldsymbol{H}_2 \cdots \boldsymbol{H}_{k-1}) \\
&= \begin{bmatrix} \boldsymbol{B}_{11} & \boldsymbol{B}_{12} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{B}_{21} & \boldsymbol{B}_{22} & \boldsymbol{B}_{23} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{B}_{32} & \boldsymbol{B}_{33} \end{bmatrix} \begin{matrix} k-1 \\ 1 \\ n-k \end{matrix} \\
&\qquad \begin{matrix} k-1 & \;1\; & n-k \end{matrix}
\end{aligned} \tag{4.9.1}
$$

中的子矩阵 $\boldsymbol{B}_{11}$ 是三对角矩阵。现在，令 $\bar{\boldsymbol{H}}_k$ 是一个 $(n-k)\times(n-k)$ Householder 矩阵，它使得 $\bar{\boldsymbol{H}}_k\boldsymbol{B}_{32}$ 是 $(n-k)\times 1$ 向量 $\boldsymbol{e}_1$ 的某个倍数，并使得若 $\boldsymbol{H}_k=\text{diag}(\boldsymbol{I}_k,\bar{\boldsymbol{H}}_k)$，则矩阵

$$\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{H}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_{k-1}\boldsymbol{H}_k=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{11} & \boldsymbol{B}_{12} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{B}_{21} & \boldsymbol{B}_{22} & \boldsymbol{B}_{23}\bar{\boldsymbol{H}}_k\\ \boldsymbol{O} & \bar{\boldsymbol{H}}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_{32} & \bar{\boldsymbol{H}}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_{33}\bar{\boldsymbol{H}}_k\end{bmatrix}\begin{matrix}k-1\\ 1\\ n-k\end{matrix} \tag{4.9.2}$$
$$\qquad\qquad\qquad\qquad\quad k-1 \qquad 1 \qquad\quad n-k$$

左上角的 $k\times k$ 矩阵为三对角矩阵。显然，若 $k=n-2$，则 $(\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2\cdots\boldsymbol{H}_{n-2})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2\cdots\boldsymbol{H}_{n-2})=\boldsymbol{T}$ 是三对角矩阵。令 $\bar{\boldsymbol{H}}_k$ 具有形式

$$\bar{\boldsymbol{H}}_k=\boldsymbol{I}-\frac{2}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}},\qquad 0\neq\boldsymbol{v}\in R^{n-k} \tag{4.9.3}$$

注意，若

$$\boldsymbol{p}=\frac{2}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}\boldsymbol{B}_{33}\boldsymbol{v},\qquad \boldsymbol{w}=\boldsymbol{p}-\frac{\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}}\boldsymbol{v}$$

则

$$\bar{\boldsymbol{H}}_k^{\mathrm{T}}B_{33}\bar{\boldsymbol{H}}_k=\boldsymbol{B}_{33}-\boldsymbol{v}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{w}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \tag{4.9.4}$$

以上分析表明，若选择 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2\cdots\boldsymbol{H}_{n-2}$，其中，$\boldsymbol{H}_k=\text{diag}(\boldsymbol{I}_k,\bar{\boldsymbol{H}}_k)$，且 $\bar{\boldsymbol{H}}_k$ 由式 (4.9.3) 确定，则 $\boldsymbol{T}=\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{H}$ 为三对角矩阵。

2. 对称 QR 分解

令人感兴趣的是，当使用一种单一移位 QR 分解时，对称的三对角带型矩阵的结构可以保持不变。单一移位 QR 分解是一种迭代的过程，称为单一移位 QR 迭代。应用于对称矩阵的单一移位 QR 迭代如下：

$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{H}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{H}$ （三对角化分解）

for $k=0,1,\cdots$

  确定实的移位 μ; $\boldsymbol{T}-\mu\boldsymbol{I}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{R}$ (QR 分解); $\boldsymbol{T}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{U}+\mu\boldsymbol{I}$;

end

单一移位 QR 迭代的关键是移位参数 μ 的选择。记

$$\boldsymbol{T}=\begin{bmatrix}a_1 & b_1 & \cdots & 0 & 0\\ b_1 & a_2 & \cdots & 0 & 0\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots\\ 0 & 0 & \cdots & a_{n-1} & b_{n-1}\\ 0 & 0 & \cdots & b_{n-1} & a_n\end{bmatrix}$$

显然，移位参数可以选取 $\mu=a_n$。但是，存在一种更有效的选择，即选择 μ 为 2×2 矩阵

$$\boldsymbol{T}(n-1:n,n-1:n)=\begin{bmatrix}a_{n-1} & b_{n-1}\\ b_{n-1} & a_n\end{bmatrix}$$

的特征值。利用特征值的定义知，μ 由

$$\det(\boldsymbol{T}(n-1:n,n-1:n)-\mu\boldsymbol{I}_2)=\begin{bmatrix} a_{n-1}-\mu & b_{n-1} \\ b_{n-1} & a_n-\mu \end{bmatrix}=0$$

决定，由此得到

$$\mu=a_n+d-\mathrm{sgn}(d)\sqrt{d^2+b_{n-1}^2} \tag{4.9.5}$$

其中，$d=(a_{n-1}-a_n)/2$，sgn 为符号函数。式 (4.9.5) 给出的 μ 值由 Wilkinson [479] 提出，常称为 Wilkinson 移位。当迭代收敛时，$\mu\to a_n$。Wilkinson 还证明了，无论是选择 $\mu=a_n$ 还是式 (4.9.5) 作移位参数，单一移位 QR 迭代都是三次方收敛的。但是，经验表明，式 (4.9.5) 的选择更好些。下面是具有 Wilkinson 移位的对称 QR 迭代算法 [184]。

算法 4.9.1 给定一个未简化的对称三对角矩阵 $\boldsymbol{T}\in R^{n\times n}$，下面的算法计算 $\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}\boldsymbol{Z}$，其中，$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{T}-\mu\boldsymbol{I})$ 为上三角矩阵，μ 是 $\boldsymbol{T}$ 右下角 2×2 子矩阵的特征值 (接近 t_{nn})，而 $\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{G}_1\cdots\boldsymbol{G}_{n-1}$ 是 Givens 旋转之积。

$d=(t_{n-1,n-1}-t_{nn})/2$;

$\mu=t_{nn}-t_{n,n-1}^2\Big/\left(d+\mathrm{sgn}(d)\sqrt{d^2+t_{n,n-1}^2}\right)$;

$x=t_{11}-\mu$;

$z=t_{21}$;

for $k=1:n-1$

  $[c,s]=\mathrm{givens}(x,z)$;

  $T=G_k^{\mathrm{T}}TG_k$;

  $G_k=G(k,k+1,\theta)$;

  if $k<n-1$

    $x=t_{k+1,k}$;

    $z=t_{k+2,k}$;

  end

end

上述算法构成了对称 QR 矩阵分解算法的基础。这种对称 QR 矩阵分解算法是计算对称矩阵的 Schur 分解的标准方法 [184]。

4.10 矩阵束的分解

令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个 $n\times n$ 矩阵。所有形式取 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B}$ (其中，$\lambda\in C$) 的矩阵组合 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 称为矩阵束或矩阵对。矩阵束的特征值记作 $\lambda(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$，定义为

$$\lambda(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})=\{\lambda\in C:\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})=0\}$$

如果 $\lambda \in \lambda(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$，并且

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}, \qquad \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}$$

则 $\boldsymbol{x}$ 称作矩阵束 $\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{B}$ 与 λ 对应的特征向量。矩阵束的特征值和特征向量又常常分别简称为广义特征值和广义特征向量。

广义特征值问题也可以等价表述为：寻找两个无病态矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 使得

$$\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Z}, \qquad \boldsymbol{B}_1 = \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z} \tag{4.10.1}$$

均为标准型。注意到

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} \quad \Longleftrightarrow \quad \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{y} = \lambda\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{y}, \qquad \boldsymbol{x} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{y}$$

这表明，$\lambda(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}) = \lambda(\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{B}_1)$。具有相同广义特征值的两个矩阵束 $\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{A}_1 - \lambda\boldsymbol{B}_1$ 称为等价。显然，等价的条件是存在非奇异的 $\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 使得式 (4.10.1) 成立。

从数值计算角度看，由 Moler 与 Stewart 叙述的下列分解 [318] 是有吸引力的。

定理 4.10.1 (广义 Schur 分解)　若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in C^{n\times b}$，则存在酉矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 使得 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{T}$ 和 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{S}$ 均为上三角矩阵。如果对于某个 k 值，t_{kk} 和 s_{kk} 二者都等于零，则 $\lambda(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 有无穷多个解。在其他情况下

$$\lambda(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}) = \{t_{ii}/s_{ii} : s_{ii} \neq 0\}$$

证明　令 $\{\boldsymbol{B}_k\}$ 是收敛于 $\boldsymbol{B}$ 的非奇异矩阵列。对每一个 k，令 $\boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_k^{-1})\boldsymbol{Q}_k = \boldsymbol{R}_k$ 是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_k^{-1}$ 的 Schur 分解，并令 $\boldsymbol{Z}_k$ 为一酉矩阵，它使得 $\boldsymbol{Z}_k^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{B}_k^{-1}\boldsymbol{Q}_k) \equiv \boldsymbol{S}_k^{-1}$ 也是上三角矩阵。于是，

$$\boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Z}_k = \boldsymbol{R}_k\boldsymbol{S}_k, \qquad \boldsymbol{Q}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}_k = \boldsymbol{S}_k$$

也都是上三角矩阵。利用 Bolzano-Weierstrass 定理知，有界的序列 $\{(\boldsymbol{Q}_k, \boldsymbol{Z}_k)\}$ 有一个收敛的子序列 $\lim(\boldsymbol{Q}_k, \boldsymbol{Z}_k) = (\boldsymbol{Q}, \boldsymbol{Z})$。容易证明，$\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 都是酉矩阵，并且 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Z}$ 和 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}$ 都是上三角的。有关 $\lambda(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的结论可以由等式

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{B}) = \det(\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Z}^{\mathrm{H}})\prod_{i=1}^{n}(t_{ii} - \lambda s_{ii})$$

直接得出。 ■

特别地，对于实矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$，有以下分解。

定理 4.10.2 (广义实 Schur 分解)　若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in R^{n\times n}$，则存在正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 使得 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Z}$ 和 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z}$ 均为上三角矩阵。

证明　参见文献 [428]。

实现计算广义特征值 $\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{B}$ 的广义实 Schur 分解可在文献 [184] 中找到。

本章小结

本章围绕矩阵的变换，介绍了 Householder 变换、Givens 旋转和相似变换。矩阵分解的主要目的是通过适当的变换，将矩阵变成某些特殊的典范形式。本章试图对矩阵的分解进行分类，并着重介绍了以下矩阵分解:

(1) 对角化分解;

(2) Cholesky 分解与 LU 分解;

(3) 三角 - 对角化分解;

(4) 三对角化分解;

(5) 矩阵束的分解。

此外，还介绍了 QR 分解在参数估计中的应用。

习　　题

4.1 已知数据矩阵 $\boldsymbol{X}=\begin{bmatrix}2 & 3\\ 1 & 2\\ 5 & 7\end{bmatrix}$。

(1) 试用 Householder 变换求 $\boldsymbol{X}$ 的 QR 分解，并使用 MATLAB 函数 [Q,R]=qr(X) 校验计算的结果。

(2) 用 Givens 旋转求 $\boldsymbol{X}$ 的 QR 分解。

4.2 已知线性方程组

$$x_1+2x_2=-3$$

$$x_1+2x_2=-3$$

$$x_1+3x_2=10$$

$$x_1-x_2=6$$

(1) 利用 Householder 变换求解方程组。

(2) 利用 Givens 旋转求解方程组。

4.3[207] 一个 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 最多使用 $m-1$ 次 Householder 变换即可三角化，变为

$$\boldsymbol{QA}=\boldsymbol{R}$$

式中，$\boldsymbol{R}$ 为上三角矩阵，并且

$$\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{Q}_{m-1}\boldsymbol{Q}_{m-2}\cdots\boldsymbol{Q}_1$$

(1) 证明

$$\det(\boldsymbol{A}) = (-1)^{m-1}\det(\boldsymbol{R})$$

(2) 利用 Householder 变换的保范性证明

$$|\det(\boldsymbol{A})| \leqslant \prod_{i=1}^{m} \|\boldsymbol{a}_i\|_2$$

式中，$\boldsymbol{a}_i$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 列。这一结果称为 Hadanard 定理。

4.4 已知数据矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1.5 & 2 \\ 3 & 3 & 5 \\ 4 & 4.5 & 10 \end{bmatrix}$$

试连续使用多次 Householder 变换将该矩阵化为双对角矩阵。

4.5 已知线性方程组

$$\begin{aligned} x_1 - 2x_2 - x_3 &= -1 \\ 2x_1 - 4x_2 + 2x_3 &= 1 \\ 2x_1 + x_3 &= 1 \\ x_1 + 5x_2 &= -2 \end{aligned}$$

试用 Gram-Schmidt 正交化方法计算 QR 分解，并求解最小二乘问题。

4.6 计算下列矩阵的 $\mathrm{LDL^T}$ 分解和 Cholesky 分解：

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 9 & 3 & -7 \\ 3 & 4 & 1 \\ -7 & 1 & 10 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 7 & 4 & -3 \\ 4 & 6 & 3 \\ -3 & 3 & 7 \end{bmatrix}$$

4.7 使用 Gram-Schmidt 正交化方法和修正 Gram-Schmidt 正交化方法求数据矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 4 & 2 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \\ 2 & 0 & -1 \\ 1 & 2 & 1 \end{bmatrix}$$

的 QR 分解，并比较两种方法的结果。

4.8 证明一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 正定，当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 存在 Cholesky 分解，即对某个可逆的上三角矩阵 $\boldsymbol{R}$，有 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}$。

4.9 令 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非负定，证明：存在一个三角矩阵 $\boldsymbol{T}$，使得 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{H}$。

4.10 利用 LU 分解，求解线性方程组

$$\begin{aligned} x_1 + 3x_2 &= 1 \\ 2x_1 + x_2 &= 3 \\ 3x_1 + 4x_2 + x_3 &= 0 \end{aligned}$$

4.11 计算下列矩阵的满秩分解:

$$A=\begin{bmatrix}1&2&3\\1&0&1\\3&2&2\end{bmatrix},\qquad B=\begin{bmatrix}2&2\\1&1\end{bmatrix}$$

4.12 证明: 若 A 正定, 则 A 存在 LU 分解 $A=LU$, 且 U 的对角元素为正数。

4.13 分别利用 Householder 变换和 Givens 旋转求解方程 $Ax=b$, 其中

$$A=\begin{bmatrix}4&2\\2&0\\1&2\\1&2\end{bmatrix},\qquad b=\begin{bmatrix}1\\1\\-1\\1\end{bmatrix}$$

4.14 利用 MATLAB 函数 [L, D] = ldlt(X) 计算下列矩阵的 $\mathrm{LDL}^{\mathrm{T}}$ 分解:

$$A=\begin{bmatrix}15&7&10\\7&8&9\\10&9&13\end{bmatrix}$$

4.15 利用 MATLAB 函数 [Q, R] = qr(A) 求矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1&1&1\\2&2&1\\1&0&1\\3&1&3\end{bmatrix}$$

的 QR 分解。若 $b=[1,2,3,4]^{\mathrm{T}}$, 试求解方程 $Ax=b$。

4.16 证明 $M\times M$ 维 Hermitian 正定矩阵 $A=[a_{ij}]$ 的 Cholesky 分解 $A=GG^{\mathrm{T}}$ 可以利用 [298, p.441]

for $j=1:M$

$$g_{ij}=\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}|g_{jk}|^2\right)^{1/2}$$

for $i=j+1:M$

$$g_{ij}=\frac{1}{g_{jj}}\left(a_{ij}-\sum_{k=1}^{j-1}a_{ik}^{*}a_{jk}\right)$$

end i

end j

计算。

4.17 求矩阵

$$A=\begin{bmatrix}1&2&5\\0&1&3\\0&0&3\end{bmatrix}$$

的 Jordan 标准型。

4.18 证明: 若非奇异矩阵 A 的 $\mathrm{LDM}^{\mathrm{T}}$ 分解存在, 则这一分解是唯一的。

4.19 [184] 令 $A=I+uu^{\mathrm{T}}$, 其中, $A\in R^{n\times n}$ 和 $\|u\|=1$。求矩阵 A 的 Cholesky 因子的主对角线和次对角线的显式表达式。

第 5 章　梯度分析与最优化

最优化理论主要研究一个函数的极值：极大值或极小值。通常，这一函数是复数向量或矩阵的某个标量值函数，称为最优化问题的目标函数。最优化理论主要讨论：(1) 唯一极值的存在性条件；(2) 求极值的解析方法或数值方法；(3) 目标函数达到其极值时独立变元的取值。本书以向量或矩阵作为独立变元的讨论对象。

5.1　梯度与无约束最优化

最简单的最优化问题是求以实数 x 作变元的实标量函数 $f(x)$ 的极大值或极小值。由于目标函数 $f(x)$ 的最大化问题与负目标函数 $-f(x)$ 的最小化等价，下面只考虑实目标函数 $f(x)$ 的最小化，即

$$\min_{x\in R} f(x) \tag{5.1.1}$$

式中，R 表示实数域。这类问题称为无约束最优化问题。

5.1.1　目标函数的极小点

在最优化问题中，通常希望得到目标函数的全局极小点，函数 $f(x)$ 在该点取最小值。严格的数学定义如下。

定义 5.1.1[337]　点 x_* 称为函数 $f(x)$ 的全局极小点，若

$$f(x_*) \leqslant f(x), \quad \forall x \in R \tag{5.1.2}$$

一般情况下，全局极小点很难求得，因为我们知道 $f(x)$ 的信息往往有限，并且比较一个函数在实数域的所有取值是一件不切实际的工作。因此，大多数的最优化算法只能求出局部极小点，函数在该点的取值达到函数在该点邻域所有取值的最小值。

定义 5.1.2　给定一个点 $\bar{x} \in R$，则点 $\bar{x}$ 的 (闭) 邻域是满足 $|x-\bar{x}| < \delta\ (\delta > 0)$ 的所有点 x 的集合。

上述定义也可以推广为向量点 $\boldsymbol{x}$ 的邻域，只要将定义中的标量 x 替换为向量 $\boldsymbol{x} \in R^n$，并且 $|x-\bar{x}|$ 替换为 $\|\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}}\|$ 即可。

定义 5.1.3[337]　点 x_* 称为函数 $f(x)$ 的局部极小点，若存在某个标量 $\delta > 0$，使得 $f(x_*) \leqslant f(x_* + \Delta x)$ 对所有满足 $0 < |\Delta x| \leqslant \delta$ 的邻域 Δx 均成立。

定义 5.1.4[337]　点 x_* 称为函数 $f(x)$ 的严格局部极小点 (strictly local minimizer)，若存在某个标量 $\delta > 0$，使得 $f(x_*) < f(x_* + \Delta x)$ 对所有满足 $0 < |\Delta x| \leqslant \delta$ 的邻域 Δx 均

成立。

局部极小点和严格局部极小点有时也分别称为函数 $f(x)$ 的弱局部极小点 (weak local minimizer) 和强局部极小点 (strong local minimizer)。

在实际应用中，比较一个目标函数 $f(x)$ 在某点及其邻域的所有取值仍然显得很麻烦。幸好，函数的 Taylor 级数展开为解决这个问题提供了一种简单的方法。

如果函数 $f(x)$ 具有连续的二阶导数，那么在 x 的一个很小的邻域 Δx 内，就可以用 Taylor 级数展开

$$f(x+\Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x + \frac{1}{2}f''(x)(\Delta x)^2 + \cdots \tag{5.1.3}$$

作为函数 $f(x+\Delta x)$ 的逼近。式中，$f'(x) = \dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}$ 和 $f''(x) = \dfrac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2}$ 分别表示函数 $f(x)$ 的一阶和二阶导数。由于 Δx 很小，式中，忽略了三次项 $(\Delta x)^3$ 和更高阶的项。

首先，将 Δx 缩小为一个非常小的区域，此时可使用 $f(x+\Delta x) = f(x) + f'(x)\Delta x$ 逼近函数 $f(x+\Delta x)$。如果 $f'(x) > 0$，则 $f(x) \leqslant f(x+\Delta x)$ 只有对 $\Delta x > 0$ 成立。反之，若 $f'(x) < 0$，则 $f(x) < f(x+\Delta x)$ 只有对 $\Delta x < 0$ 成立。显然，这与定义 5.1.2 相矛盾。因此，唯一合理的选择是令 $f'(x) = 0$。

满足 $f'(x) = 0$ 的点 x 称为函数 $f(x)$ 的平稳点 (stationary point)，它有可能是极小 (值) 点、极大 (值) 点或拐点。因此，平稳点只是目标函数的候选极值点。

为了进一步确定极小点，在一个稍大一些的区域 Δx 内考虑函数 $f(x+\Delta x)$ 的取值。由于 $f(x+\Delta x) = f(x) + f''(x)(\Delta x)^2$，显然若 $f''(x) > 0$，则一定有 $f(x) < f(x+\Delta x)$ 对所有满足 $0 < |\Delta x| \leqslant \delta$ 的 Δx 成立。因此，如果函数 $f(x)$ 是连续二阶可微分的，求该函数的局部极小点最简单的方法是联合求解

$$\boxed{f'(x) = \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = 0 \quad 和 \quad f''(x) = \frac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2} > 0} \tag{5.1.4}$$

若没有第二个方程，则第一个方程的解只是平稳点。同时满足第一和第二个方程的解 x 给出目标函数的局部极小点。注意，式 (5.1.4) 只是目标函数取局部极小点的充分条件，而不是必要条件。

顺便指出，求函数 $f(x)$ 的局部极大点最简单的方法是联合求解

$$\boxed{f'(x) = \frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x} = 0 \quad 和 \quad f''(x) = \frac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2} < 0}$$

类似地，这两个方程只是目标函数取局部极大点的充分条件，而非必要条件。

由于函数 $f(x)$ 在某点 x_* 的一阶导数 $f'(x)|_{x=x_*}$ 反映了函数在该点的变化率，一阶导数 $f'(x)$ 称为函数 $f(x)$ 的梯度函数，$f'(x_*)$ 称为函数 $f(x)$ 在点 x_* 的梯度值。

令 $f(x)$ 为实值函数，则有以下定义：

(1) 函数 $f(x)$ 称为凸函数，若对于任意选择的点 x_1 和 x_2 及标量 $a \neq 0$，函数满足

$$f(ax_1 + (1-a)x_2) \leqslant af(x_1) + (1-a)f(x_2) \tag{5.1.5}$$

(2) 函数 $f(x)$ 称为严格凸函数，若对于任意选择的点 x_1 和 x_2 及标量 $a \neq 0$，函数满足

$$f(ax_1 + (1-a)x_2) < af(x_1) + (1-a)f(x_2) \tag{5.1.6}$$

(3) 函数 $f(x)$ 称为 (严格) 凹函数，若 $-f(x)$ 为 (严格) 凸函数。

下面的定理表明，对于凸的目标函数，局部极小点直接给出全局极小点。

定理 5.1.1 凸函数 $f(x)$ 的任何局部极小点 x_* 都是该函数的一个全局极小点。若凸函数 $f(x)$ 是可微分的，则满足 $\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}=0$ 的平稳点 x_* 是 $f(x)$ 的一个全局极小点。

证明[337] 假定 x_* 是局部极小点，但不是一个全局极小点。于是，可以求出一点 $z \in R$ 满足 $f(z) < f(x_*)$。考虑从 x_* 到 z 的线段上的点 x，则

$$x = \lambda z + (1-\lambda)x_*, \qquad \lambda \in (0,1] \tag{5.1.7}$$

根据凸函数的性质，有

$$f(x) \leqslant \lambda f(z) + (1-\lambda)f(x_*) < f(x_*) \tag{5.1.8}$$

即 $f(x_*)$ 不是局部极小点，与假设矛盾。因此，局部极小点 x_* 必定是一个全局极小点。

为了证明定理的第二部分，令满足 $\dfrac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}=0$ 的平稳点 x_* 不是一个全局极小点，并按照上述方法选择点 z。于是，根据凸函数的性质，有

$$\begin{aligned}
\nabla f(x_*)(z-x_*) &= \left.\frac{\mathrm{d}f(x)}{\mathrm{d}x}\right|_{x=x_*}(z-x_*) \\
&= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}f(x_*+\lambda(z-x_*))|_{\lambda=0} \\
&= \lim_{\lambda\to 0+}\frac{f(x_*+\lambda(z-x_*))-f(x_*)}{\lambda} \\
&\leqslant \lim_{\lambda\to 0+}\frac{\lambda f(z)+(1-\lambda)f(x_*)-f(x_*)}{\lambda} \\
&= f(z)-f(x_*) \\
&< 0
\end{aligned}$$

因此，梯度 $\nabla f(x_*) \neq 0$，即 x_* 不是平稳点，与假设条件矛盾。 ■

将定义 5.1.3 和定义 5.1.4 加以推广，可以得到以实向量为变元的实目标函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的极小点的定义如下。

定义 5.1.5[337] 点 $\boldsymbol{x}_*$ 称为函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的严格局部极小点，若存在一个标量 $\delta > 0$，使得 $f(\boldsymbol{x}_*) < f(\boldsymbol{x}_* + \Delta\boldsymbol{x})$ 对满足 $0 < \|\Delta\boldsymbol{x}\| \leqslant \delta$ 的所有 $\Delta\boldsymbol{x}$ 均成立。

定义 5.1.6[405] 点 $\boldsymbol{x}_*$ 称为函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的 (弱) 局部极小点，若存在某个标量 $\delta > 0$，使得 $f(\boldsymbol{x}_*) \leqslant f(\boldsymbol{x}_* + \Delta\boldsymbol{x})$ 对满足 $0 < \|\Delta\boldsymbol{x}\| \leqslant \delta$ 的所有 $\Delta\boldsymbol{x}$ 均成立。

若定义 5.1.5 对 $\delta = \infty$ 成立，则称点 $\boldsymbol{x}_*$ 是函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的唯一全局极小点。若对 $\delta = \infty$，只是定义 5.1.6 成立，则称点 $\boldsymbol{x}_*$ 为函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的全局极小点。

5.1.2 实值函数相对于实向量的梯度

相对于 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 的梯度算子记作 $\nabla_{\boldsymbol{x}}$，定义为

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} \stackrel{\text{def}}{=} \left[\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial}{\partial x_n}\right]^{\mathrm{T}} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{5.1.9}$$

因此，以 $n\times 1$ 实向量 $\boldsymbol{x}$ 为变元的实标量函数 $f(\boldsymbol{x})$ 相对于 $\boldsymbol{x}$ 的梯度为一 $n\times 1$ 列向量，定义为

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) \stackrel{\text{def}}{=} \left[\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\right]^{\mathrm{T}} = \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} \tag{5.1.10}$$

梯度方向的负方向称为变元 $\boldsymbol{x}$ 的梯度流 (gradient flow)，记作

$$\dot{\boldsymbol{x}} = -\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) \tag{5.1.11}$$

从梯度的定义式可以看出：

(1) 一个以向量为变元的标量函数的梯度为一向量。

(2) 梯度的每个分量给出了标量函数在该分量方向上的变化率。

梯度向量最重要的性质之一是，它指出了当变元增大时函数 f 的最大增大率。相反，梯度的负值 (简称负梯度) 指出了当变元增大时函数 f 的最大减小率。根据这样一种性质，即可设计出求一函数极小值的迭代算法，这将在后面详细讨论。

类似地，实值函数 $f(\boldsymbol{x})$ 相对于 $1\times n$ 行向量 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 的梯度为 $1\times n$ 行向量，定义为

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} \stackrel{\text{def}}{=} \left[\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_1}, \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial x_n}\right] = \nabla_{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} f(\boldsymbol{x}) \tag{5.1.12}$$

m 维行向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = [f_1(\boldsymbol{x}), f_2(\boldsymbol{x}), \cdots, f_m(\boldsymbol{x})]$ 相对于 n 维实向量 $\boldsymbol{x}$ 的梯度为一 $n\times m$ 矩阵，定义为

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} & \cdots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix} = \nabla_{\boldsymbol{x}} \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) \tag{5.1.13}$$

下面看向量函数的两个特例。

若 $m\times 1$ 向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y} = [y_1, y_2 \cdots, y_m]^{\mathrm{T}}$，其中，$y_1, y_2, \cdots, y_m$ 是向量的标量函数。一阶梯度

$$\frac{\partial \boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial y_1}{\partial x_1} & \dfrac{\partial y_1}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial y_1}{\partial x_n} \\ \dfrac{\partial y_2}{\partial x_1} & \dfrac{\partial y_2}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial y_2}{\partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial y_m}{\partial x_1} & \dfrac{\partial y_m}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial y_m}{\partial x_n} \end{bmatrix} \tag{5.1.14}$$

是一个 $m \times n$ 矩阵，称为向量函数 $\boldsymbol{y} = [y_1, y_2 \cdots, y_m]^{\mathrm{T}}$ 的 Jacobi 矩阵。

若 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}) = [x_1, x_2, \cdots, x_n]$，则

$$\boxed{\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{I}} \tag{5.1.15}$$

式中，$\boldsymbol{I}$ 为单位矩阵。这是一个非常有用的结果。

例 5.1.1 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 均与向量 $\boldsymbol{x}$ 无关，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}$$

例 5.1.2 注意到 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \langle \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}, \boldsymbol{x}\rangle = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}\rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$，故

$$\frac{\partial \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

例 5.1.3 由于

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_{ij}x_i x_j$$

可求出梯度 $\dfrac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}$ 的第 k 个分量为

$$\left[\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}\right]_k = \frac{\partial}{\partial x_k}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_{ij}x_i x_j = \sum_{i=1}^{n} A_{ik}x_i + \sum_{j=1}^{n} A_{kj}x_j$$

即有

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$$

特别地，若 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

归纳以上三个例子的结果及其他结果，便得到实值函数 $f(\boldsymbol{x})$ 相对于列向量 $\boldsymbol{x}$ 的下述几个常用的梯度公式 [296],[290]。

(1) 若 $f(\boldsymbol{x}) = c$ 为常数，则梯度 $\dfrac{\partial c}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{0}$。

(2) 线性法则：若 $f(\boldsymbol{x})$ 和 $g(\boldsymbol{x})$ 分别是向量 $\boldsymbol{x}$ 的实值函数，c_1 和 c_2 为实常数，则

$$\boxed{\frac{\partial[c_1 f(\boldsymbol{x}) + c_2 g(\boldsymbol{x})]}{\partial \boldsymbol{x}} = c_1\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} + c_2\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}} \tag{5.1.16}$$

(3) 乘积法则：

① 若 $f(\boldsymbol{x})$ 和 $g(\boldsymbol{x})$ 都是向量 $\boldsymbol{x}$ 的实值函数，则

$$\boxed{\frac{\partial f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = g(\boldsymbol{x})\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} + f(\boldsymbol{x})\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}} \tag{5.1.17}$$

② 若 $f(\boldsymbol{x}),g(\boldsymbol{x})$ 和 $h(\boldsymbol{x})$ 都是向量 $\boldsymbol{x}$ 的实值函数，则

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x})h(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=&g(\boldsymbol{x})h(\boldsymbol{x})\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}+f(\boldsymbol{x})h(\boldsymbol{x})\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}+\\&f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x})\frac{\partial h(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\end{aligned}} \tag{5.1.18}$$

(4) 商法则：若 $g(\boldsymbol{x})\neq 0$，则

$$\boxed{\frac{\partial f(\boldsymbol{x})/g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{1}{g^2(\boldsymbol{x})}\left[g(\boldsymbol{x})\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}-f(\boldsymbol{x})\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right]} \tag{5.1.19}$$

(5) 链式法则：若 $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的向量值函数，则

$$\boxed{\frac{\partial f(\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{\partial \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\frac{\partial f(\boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{y}}} \tag{5.1.20}$$

式中，$\dfrac{\partial \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$ 为 $n\times n$ 矩阵。

(6) 若 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 是无关的常数向量，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{a},\qquad \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{a}$$

(7) 若 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 是无关的常数向量，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{\partial \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{a},\qquad \frac{\partial \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})\boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{\partial \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{a}$$

(8) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 均与向量 $\boldsymbol{x}$ 无关，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{y},\qquad \frac{\partial \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$$

(9) 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个与向量 $\boldsymbol{x}$ 无关的矩阵，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A},\qquad \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}$$

特别地，若 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，则有 $\dfrac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}}=2\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$。

(10) 若 $\boldsymbol{A}$ 是与向量 $\boldsymbol{x}$ 无关，而 $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})$ 与向量 $\boldsymbol{x}$ 的元素有关，则

$$\frac{\partial [\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{\partial [\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})$$

(11) 若 $\boldsymbol{A}$ 是一个与向量 $\boldsymbol{x}$ 无关的矩阵，而 $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})$ 和 $\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x})$ 是与向量 $\boldsymbol{x}$ 的元素有关的列向量，则

$$\frac{\partial [\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\frac{\partial [\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x})+\frac{\partial [\boldsymbol{z}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})$$

(12) 令 $\boldsymbol{x}$ 为 $n\times 1$ 向量，$\boldsymbol{a}$ 为 $m\times 1$ 常数向量，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别为 $m\times n$ 和 $m\times m$ 常数矩阵，且 $\boldsymbol{B}$ 为对称矩阵，则

$$\frac{\partial(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}}=-2\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})$$

5.1.3 实值函数的梯度矩阵

在最优化问题中，需要最优化的对象往往有可能是某个加权矩阵。因此，有必要分析实值函数相对于矩阵变元的梯度。

实值函数 $f(\boldsymbol{A})$ 相对于 $m\times n$ 实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的梯度为一 $m\times n$ 矩阵，简称梯度矩阵，定义为

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}\overset{\text{def}}{=}\begin{bmatrix}\frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial A_{11}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial A_{12}} & \cdots & \frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial A_{1n}}\\ \frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial A_{21}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial A_{22}} & \cdots & \frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial A_{2n}}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial A_{m1}} & \frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial A_{m2}} & \cdots & \frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial A_{mn}}\end{bmatrix}=\nabla_{\boldsymbol{A}}f(\boldsymbol{A}) \tag{5.1.21}$$

式中，A_{ij} 是矩阵的元素。

实值函数相对于矩阵变元的梯度具有以下性质 [290]。

(1) 若 $f(\boldsymbol{A})=c$ 为常数，其中，$\boldsymbol{A}$ 为 $m\times n$ 矩阵，则梯度 $\dfrac{\partial c}{\partial\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{O}_{m\times n}$。

(2) 线性法则：若 $f(\boldsymbol{A})$ 和 $g(\boldsymbol{A})$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的实值函数，c_1 和 c_2 为实常数，则

$$\boxed{\frac{\partial[c_1f(\boldsymbol{A})+c_2g(\boldsymbol{A})]}{\partial\boldsymbol{A}}=c_1\frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}+c_2\frac{\partial g(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}} \tag{5.1.22}$$

(3) 乘积法则：若 $f(\boldsymbol{A}),g(\boldsymbol{A})$ 和 $h(\boldsymbol{A})$ 都是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的实值函数，则

$$\boxed{\frac{\partial f(\boldsymbol{A})g(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}=g(\boldsymbol{A})\frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}+f(\boldsymbol{A})\frac{\partial g(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}} \tag{5.1.23}$$

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial f(\boldsymbol{A})g(\boldsymbol{A})h(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}=&\,g(\boldsymbol{A})h(\boldsymbol{A})\frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}+f(\boldsymbol{A})h(\boldsymbol{A})\frac{\partial g(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}+\\ &f(\boldsymbol{A})g(\boldsymbol{A})\frac{\partial h(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}\end{aligned}} \tag{5.1.24}$$

(4) 商法则：若 $g(\boldsymbol{A})\neq 0$，则

$$\boxed{\frac{\partial f(\boldsymbol{A})/g(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}=\frac{1}{g^2(\boldsymbol{A})}\left[g(\boldsymbol{A})\frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}-f(\boldsymbol{A})\frac{\partial g(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}\right]} \tag{5.1.25}$$

(5) 链式法则：令 $\boldsymbol{A}$ 为 $m\times n$ 矩阵，且 $y=f(\boldsymbol{A})$ 和 $g(y)$ 分别是以矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和标量 y 为变元的实值函数，则

$$\boxed{\frac{\partial g(f(\boldsymbol{A}))}{\partial \boldsymbol{A}}=\frac{\mathrm{d}g(y)}{\mathrm{d}y}\frac{\partial f(\boldsymbol{A})}{\partial \boldsymbol{A}}} \tag{5.1.26}$$

(6) 若 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n},\boldsymbol{x}\in R^{m\times 1},\boldsymbol{y}\in R^{n\times 1}$，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{A}}=\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}} \tag{5.1.27}$$

(7) 若 $\boldsymbol{A}\in R^{n\times n}$ 非奇异，$\boldsymbol{x}\in R^{n\times 1},\boldsymbol{y}\in R^{n\times 1}$，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{A}}=-\boldsymbol{A}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{-\mathrm{T}},\qquad \boldsymbol{A}^{-\mathrm{T}}=(\boldsymbol{A}^{-1})^{\mathrm{T}} \tag{5.1.28}$$

(8) 若 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n},\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in R^{n\times 1}$，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{A}}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}) \tag{5.1.29}$$

(9) 若 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n},\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in R^{m\times 1}$，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{A}}=(\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{A} \tag{5.1.30}$$

(10) 指数函数的梯度

$$\frac{\partial \exp(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{A}}=\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\exp(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}) \tag{5.1.31}$$

5.1.4 迹函数的梯度矩阵

有趣的是，二次型目标函数可以利用矩阵的迹加以重写。因为一标量可视为 1×1 矩阵，所以二次型目标函数的迹直接等于函数本身，即 $f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})$。利用迹的性质，又可将目标函数进一步表示成

$$f(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}})$$

因此，二次型目标函数 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 等于其核矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和向量外积 $\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 的乘积的迹 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}})$。

下面举几个例子说明如何求迹的梯度。

例 5.1.4 对于 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，由于 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})=\sum_{i=1}^{n}A_{ii}$，故梯度 $\dfrac{\partial\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}$ 的 (i,j) 元素为

$$\left[\frac{\partial\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}\right]_{ij}=\frac{\partial}{\partial A_{ij}}\sum_{k=1}^{n}A_{kk}=\begin{cases}1, & j=i\\ 0, & j\neq 0\end{cases}$$

即有 $\dfrac{\partial\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})}{\partial\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{I}$。

例 5.1.5 考查目标函数 $f(\boldsymbol{A}) = \text{tr}(\boldsymbol{AB})$，其中，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别为 $m \times n$ 和 $n \times m$ 实矩阵。首先，矩阵乘积的元素为 $[\boldsymbol{AB}]_{ij} = \sum_{l=1}^{n} A_{il}B_{lj}$，故矩阵乘积的迹 $\text{tr}(\boldsymbol{AB}) = \sum_{p=1}^{m}\sum_{l=1}^{n} A_{pl}B_{lp}$。于是，梯度 $\dfrac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{AB})}{\partial \boldsymbol{A}}$ 是一个 $m \times n$ 矩阵，其元素为

$$\left[\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{AB})}{\partial \boldsymbol{A}}\right]_{ij} = \frac{\partial}{\partial A_{ij}}\left(\sum_{p=1}^{m}\sum_{l=1}^{n} A_{pl}B_{lp}\right) = B_{ji}$$

即有

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{AB})}{\partial \boldsymbol{A}} = \nabla_{\boldsymbol{A}} \text{tr}(\boldsymbol{AB}) = \boldsymbol{B}^{\text{T}}$$

又由于 $\text{tr}(\boldsymbol{BA}) = \text{tr}(\boldsymbol{AB})$，故

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{AB})}{\partial \boldsymbol{A}} = \frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{BA})}{\partial \boldsymbol{A}} = \boldsymbol{B}^{\text{T}}$$

例 5.1.6 由于 $\text{tr}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\text{T}}) = \text{tr}(\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\text{T}}) = \boldsymbol{x}^{\text{T}}\boldsymbol{y}$，易知

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\text{T}})}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\text{T}})}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{y}$$

通过以上几个例子，并综合文献 [296]，[239, p.491]，[290] 的有关结果，可得到关于迹的梯度矩阵的一些常用公式。

(1) 单个矩阵的迹的梯度矩阵

① $\boldsymbol{W}$ 是 $m \times m$ 矩阵时，有

$$\boxed{\frac{\partial\, \text{tr}(\boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} = \boldsymbol{I}_m} \tag{5.1.32}$$

② $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{W}$ 可逆时，有

$$\boxed{\frac{\partial\, \text{tr}(\boldsymbol{W}^{-1})}{\partial \boldsymbol{W}} = -(\boldsymbol{W}^{-1})^{\text{T}}} \tag{5.1.33}$$

③ 对于两个向量的外积，有

$$\boxed{\frac{\partial\, \text{tr}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{y}^{\text{T}})}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{\partial\, \text{tr}(\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\text{T}})}{\partial \boldsymbol{x}} = \boldsymbol{y}} \tag{5.1.34}$$

(2) 两个矩阵乘积的迹的梯度

① 若 $\boldsymbol{W} \in R^{m\times n}, \boldsymbol{A} \in R^{n\times m}$，则

$$\boxed{\frac{\partial\, \text{tr}(\boldsymbol{WA})}{\partial \boldsymbol{W}} = \frac{\partial\, \text{tr}(\boldsymbol{AW})}{\partial \boldsymbol{W}} = \boldsymbol{A}^{\text{T}}} \tag{5.1.35}$$

特别地，有 [213]

$$\boxed{\frac{\partial\, \text{tr}(\boldsymbol{WA})}{\partial \boldsymbol{W}} = \frac{\partial\, \text{tr}(\boldsymbol{AW})}{\partial \boldsymbol{W}} = \boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\text{T}} - \text{diag}(\boldsymbol{A}), \quad \boldsymbol{W}\text{ 为对称矩阵}} \tag{5.1.36}$$

② 当 $\boldsymbol{W} \in R^{m\times n}, \boldsymbol{A} \in R^{m\times n}$ 时，有

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})}{\partial \boldsymbol{W}} = \frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})}{\partial \boldsymbol{W}} = \boldsymbol{A}} \tag{5.1.37}$$

③ 对于 $\boldsymbol{W} \in R^{m\times n}$，有

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})}{\partial \boldsymbol{W}} = \frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} = 2\boldsymbol{W}} \tag{5.1.38}$$

④ 令 $\boldsymbol{W} \in R^{m\times m}$，则

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^2)}{\partial \boldsymbol{W}} = \frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}\boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} = 2\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}} \tag{5.1.39}$$

⑤ 若 $\boldsymbol{W}, \boldsymbol{A} \in R^{m\times m}$，并且 $\boldsymbol{W}$ 非奇异，则

$$\boxed{\frac{\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{-1})}{\partial \boldsymbol{W}} = -(\boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{-1})^{\mathrm{T}}} \tag{5.1.40}$$

(3) 三个矩阵乘积的迹的梯度

① 若 $\boldsymbol{W} \in R^{m\times n}, \boldsymbol{A} \in R^{m\times m}$，则

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} = (\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{W}} \tag{5.1.41}$$

特别地，当 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵时，有 $\dfrac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} = 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}$。

② 令 $\boldsymbol{W} \in R^{m\times n}, \boldsymbol{A} \in R^{n\times n}$，则

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})}{\partial \boldsymbol{W}} = \boldsymbol{W}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})} \tag{5.1.42}$$

特别地，当 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵时，$\dfrac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})}{\partial \boldsymbol{W}} = 2\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}$。

③ 当 $\boldsymbol{W}, \boldsymbol{A}, \boldsymbol{B} \in R^{m\times m}$，并且 $\boldsymbol{W}$ 非奇异时，有

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{B})}{\partial \boldsymbol{W}} = -(\boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{-1})^{\mathrm{T}}} \tag{5.1.43}$$

(4) 四个矩阵乘积的迹的梯度

① $\boldsymbol{W} \in R^{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{A} \in R^{p\times m}$ 时：

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})}{\partial \boldsymbol{W}} = 2\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}} \tag{5.1.44}$$

② $\boldsymbol{W} \in R^{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{A} \in R^{p\times n}$ 时，有

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})}{\partial \boldsymbol{W}} = 2\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}} \tag{5.1.45}$$

③ $\boldsymbol{W}\in R^{m\times n},\boldsymbol{A}\in R^{p\times m},\boldsymbol{B}\in R^{m\times p}$ 时，有

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})}{\partial\,\boldsymbol{W}}=(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{W}} \tag{5.1.46}$$

④ $\boldsymbol{W}\in R^{m\times n},\boldsymbol{A}\in R^{p\times n},\boldsymbol{B}\in R^{n\times p}$ 时，有

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{B})}{\partial\,\boldsymbol{W}}=\boldsymbol{W}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})} \tag{5.1.47}$$

⑤ $\boldsymbol{W}\in R^{m\times n},\boldsymbol{A}\in R^{n\times n},\boldsymbol{B}\in R^{m\times m}$ 时，有

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})}{\partial\,\boldsymbol{W}}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}} \tag{5.1.48}$$

⑥ $\boldsymbol{W}\in R^{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in R^{n\times m}$ 时，有

$$\boxed{\frac{\partial\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}\boldsymbol{B})}{\partial\,\boldsymbol{W}}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}} \tag{5.1.49}$$

下面的典型例子说明，期望值目标函数转换成矩阵的迹之后，可更方便求解最优化问题。

例 5.1.7 [523] 在移动通信的一个码分多址 (CDMA) 系统中，共有 K 个用户在通信，通信基站分配给第 k 个用户的扩频波形向量为 $\boldsymbol{s}_k(t)$。假定 A_k 是用户 k 的信号幅值，而 b_k 为用户 k 在第 t 个码元间隔 (即 $t=tT$，其中，T 表示码元间隔) 发射的比特信号 (±1)。经过解扩频后，基站的接收信号向量由

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}\boldsymbol{b}+\boldsymbol{n}$$

给出，式中，$\boldsymbol{A}=\mathrm{diag}(A_1,A_2,\cdots,A_K)$, $\boldsymbol{b}=[b_1,b_2,\cdots,b_K]^{\mathrm{T}}$，并且用户扩频波形自相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的元素 r_{ij} 定义为

$$r_{ij}=\int_0^T \boldsymbol{s}_i(t)\boldsymbol{s}_j(t)\mathrm{d}t$$

现在希望设计一个多用户检测器 $\boldsymbol{M}=[\boldsymbol{m}_1,\boldsymbol{m}_2,\cdots,\boldsymbol{m}_K]$，其中，$\boldsymbol{m}_k$ 是第 k 个用户的检测器，即使用

$$\hat{b}_k=\mathrm{sgn}(\boldsymbol{m}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y})$$

作为用户 k 发射字符的估计。这一准则称为最小均方误差 (minimum mean square error，MMSE) 准则。将 K 个用户的最优检测器综合起来考虑，则设计 K 个用户的检测器 $\boldsymbol{M}$ 的目标函数为

$$J(\boldsymbol{M})=\mathrm{E}\{\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}\|_2^2\}$$

使其最小化，即可获得最优的盲多用户检测器 $\boldsymbol{M}$。

利用矩阵的迹的性质，有

$$\begin{aligned}J(\boldsymbol{M}) &= \mathrm{E}\{(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})\}\\&= \mathrm{E}\{\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\right)\}\\&= \mathrm{tr}\left(\mathrm{E}\{(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\}\right)\\&= \mathrm{tr}\left(\mathrm{cor}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})\right)\end{aligned}$$

式中，$\mathrm{cor}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}) = \mathrm{E}\{(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}\}$ 为自相关矩阵。在加性噪声向量 $\boldsymbol{n}$ 与用户信号统计不相关的条件下，可以证明自相关矩阵为

$$\mathrm{cor}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{I} + \boldsymbol{M}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{R}+\sigma^2\boldsymbol{R})\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{R}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{M}\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}$$

式中，σ^2 为加性白噪声的共同方差。于是，目标函数可以写作

$$\begin{aligned}J(\boldsymbol{M}) &= \mathrm{tr}\left(\mathrm{cor}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{M}\boldsymbol{y})\right)\\&= \mathrm{tr}(\boldsymbol{I}) + \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{R}+\sigma^2\boldsymbol{R})\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\right) - \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}) - \mathrm{tr}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{R}\boldsymbol{A})\end{aligned}$$

利用迹函数的梯度公式

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})}{\partial \boldsymbol{M}} = \frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}})}{\partial \boldsymbol{M}} = \boldsymbol{B}$$

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{B})}{\partial \boldsymbol{M}} = \frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{M})}{\partial \boldsymbol{M}} = \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$$

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}})}{\partial \boldsymbol{M}} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{D}+\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}})$$

并注意到 $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{R}+\sigma^2\boldsymbol{R}$ 为对称矩阵 (因为 $\boldsymbol{R}$ 为对称矩阵，$\boldsymbol{A}$ 为对角矩阵)，易知

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{M})}{\partial \boldsymbol{M}} = 2\boldsymbol{M}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{R}+\sigma^2\boldsymbol{R}) - 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}$$

令其等于零，即得 $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{R}+\sigma^2\boldsymbol{R}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{R}$。若 $\boldsymbol{R}$ 非奇异，立即得到最优盲多用户检测器为

$$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}^2+\sigma^2\boldsymbol{I})^{-1}$$

5.1.5　行列式的梯度矩阵

和矩阵的迹一样，矩阵的行列式也是以矩阵为变元的实标量函数，故存在行列式相对于实矩阵的梯度。下面介绍行列式的梯度定义 [411, pp.336~337]。

令矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的元素 w_{ij} 相互独立。显然，偏导

$$\frac{\partial \boldsymbol{W}}{\partial w_{ij}} = \boldsymbol{E}_{ij} \tag{5.1.50}$$

式中，$\boldsymbol{E}_{ij}$ 是一个除 (i,j) 元素为 1 外，其余元素均为 0 的矩阵，即 $\boldsymbol{E}_{ij} = \boldsymbol{e}_i\boldsymbol{e}_j^{\mathrm{T}}$，其中，$\boldsymbol{e}_i$ 为单位向量，其第 i 个元素为 1，其余元素全部为 0。

类似地，若矩阵 $\boldsymbol{W}$ 为对称矩阵，则

$$\frac{\partial \boldsymbol{W}}{\partial w_{ij}} = \boldsymbol{E}_{ij} + \boldsymbol{E}_{ji} - \delta_{ij}\boldsymbol{E}_{ij} \tag{5.1.51}$$

式中，$\delta_{ij} = 0\ (i \neq j)$ 或者 $\delta_{ij} = 1\ (i = j)$。

由 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的行列式的定义 $|\boldsymbol{W}| = \sum_{j=1}^{n} w_{ij}\mathrm{cof}(\boldsymbol{W}_{ij})$ 对所有 $i = 1, 2, \cdots, n$ 成立，其中，$\mathrm{cof}(\boldsymbol{W}_{ij})$ 是元素 w_{ij} 的余子式。

与式 (5.1.50) 相对应，有

$$\frac{\partial |\boldsymbol{W}|}{\partial w_{ij}} = \mathrm{cof}(\boldsymbol{W}_{ij}), \qquad \boldsymbol{W}\text{ 的元素相互独立} \tag{5.1.52}$$

与式 (5.1.51) 对应的行列式偏导结果为

$$\begin{aligned}\frac{\partial |\boldsymbol{W}|}{\partial w_{ij}} &= \mathrm{cof}(\boldsymbol{W}_{ij}) + \mathrm{cof}(\boldsymbol{W}_{ji}) - \delta_{ij}\mathrm{cof}(\boldsymbol{W}_{ij}) \\ &= (1 - \delta_{ij})\mathrm{cof}(\boldsymbol{W}_{ij}) + \mathrm{cof}(\boldsymbol{W}_{ji}), \qquad \boldsymbol{W}\text{ 为对称矩阵}\end{aligned} \tag{5.1.53}$$

令 $i, j = 1, 2, \cdots, n$，并将式 (5.1.52) 汇集成矩阵形式，即得行列式 $|\boldsymbol{W}|$ 关于矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的偏导 (即梯度) 为

$$\frac{\partial |\boldsymbol{W}|}{\partial \boldsymbol{W}} = (\boldsymbol{W}^{\#})^{\mathrm{T}} = |\boldsymbol{W}|(\boldsymbol{W}^{-1})^{\mathrm{T}}, \qquad \boldsymbol{W}\text{ 的元素相互独立} \tag{5.1.54}$$

其中，$\boldsymbol{W}^{\#}$ 表示矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的伴随矩阵。在得到上式的过程中，使用了逆矩阵与行列式之间的关系式 $\boldsymbol{W}^{-1} = \boldsymbol{W}^{\#}/|\boldsymbol{W}|$。

类似地，由式 (5.1.53) 又有

$$\begin{aligned}\frac{\partial |\boldsymbol{W}|}{\partial \boldsymbol{W}} &= 2\boldsymbol{W}^{\#} - \mathrm{diag}(\boldsymbol{W}^{\#}) \\ &= |\boldsymbol{W}|\left[2\boldsymbol{W}^{-1} - \mathrm{diag}(\boldsymbol{W}^{-1})\right], \qquad \boldsymbol{W}\text{ 为对称矩阵}\end{aligned} \tag{5.1.55}$$

另外，对于非奇异矩阵 $\boldsymbol{W}$，有

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{W}} \log |\boldsymbol{W}| = \frac{1}{|\boldsymbol{W}|}\frac{\partial |\boldsymbol{W}|}{\partial \boldsymbol{W}} \tag{5.1.56}$$

代入式 (5.1.54) 和式 (5.1.55) 的结果，式 (5.1.56) 又可分别写作

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{W}} \log |\boldsymbol{W}| = (\boldsymbol{W}^{-1})^{\mathrm{T}}, \quad \boldsymbol{W}\text{ 的元素相互独立} \tag{5.1.57}$$

$$= 2\boldsymbol{W}^{-1} - \mathrm{diag}(\boldsymbol{W}^{-1}), \quad \boldsymbol{W}\text{ 为对称矩阵} \tag{5.1.58}$$

矩阵的行列式的梯度 (矩阵) 具有以下性质 [411],[296],[290]。

(1) 单个非奇异矩阵的行列式的梯度

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial|\boldsymbol{W}|}{\partial\boldsymbol{W}}&=|\boldsymbol{W}|(\boldsymbol{W}^{-1})^{\mathrm{T}}=(\boldsymbol{W}^{\#})^{\mathrm{T}}\\ \frac{\partial|\boldsymbol{W}^{-1}|}{\partial\boldsymbol{W}}&=-|\boldsymbol{W}|^{-1}(\boldsymbol{W}^{-1})^{\mathrm{T}}\end{aligned}} \tag{5.1.59}$$

式中，$\boldsymbol{W}^{\#}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的伴随矩阵。

(2) 行列式对数的梯度

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{W}}\log|\boldsymbol{W}|&=\frac{1}{|\boldsymbol{W}|}\frac{\partial|\boldsymbol{W}|}{\partial\boldsymbol{W}},\quad \boldsymbol{W}\text{ 非奇异}\\ &=(\boldsymbol{W}^{-1})^{\mathrm{T}},\quad \boldsymbol{W}\text{ 的元素相互独立}\\ &=2\boldsymbol{W}^{-1}-\mathrm{diag}(\boldsymbol{W}^{-1}),\quad \text{若 }\boldsymbol{W}\text{ 为对称矩阵}\end{aligned}} \tag{5.1.60}$$

(3) 两个矩阵乘积的行列式的梯度

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial|\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}|}{\partial\boldsymbol{W}}&=2|\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}|(\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{W},\quad \mathrm{rank}(\boldsymbol{W}_{m\times n})=m\\ \frac{\partial|\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}|}{\partial\boldsymbol{W}}&=2|\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}|\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W})^{-1},\quad \mathrm{rank}(\boldsymbol{W}_{m\times n})=n\\ \frac{\partial|\boldsymbol{W}^{2}|}{\partial\boldsymbol{W}}&=2|\boldsymbol{W}|^{2}(\boldsymbol{W}^{-1})^{\mathrm{T}},\quad \mathrm{rank}(\boldsymbol{W}_{m\times m})=m\end{aligned}} \tag{5.1.61}$$

(4) 三个矩阵乘积的行列式的梯度

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial|\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}\boldsymbol{B}|}{\partial\boldsymbol{W}}&=|\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}\boldsymbol{B}|\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\\ \frac{\partial|\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}|}{\partial\boldsymbol{W}}&=2\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W})^{-1},\quad |\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}|>0\\ \frac{\partial|\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}|}{\partial\boldsymbol{W}}&=[(\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})^{-1}]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{A})\\ &=2(\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{W}\boldsymbol{A},\quad \boldsymbol{A}\text{ 为对称矩阵}\end{aligned}} \tag{5.1.62}$$

5.1.6 Hessian 矩阵

实值函数 $f(\boldsymbol{x})$ 相对于 $m\times 1$ 实向量 $\boldsymbol{x}$ 的二阶偏导是一个由 m^2 个二阶偏导组成的矩阵 (称为 Hessian 矩阵)，定义为

$$\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}\partial\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}=\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}}\right] \tag{5.1.63}$$

或者简写为梯度的梯度

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x})=\nabla_{\boldsymbol{x}}(\nabla_{\boldsymbol{x}}f(\boldsymbol{x})) \tag{5.1.64}$$

根据定义，Hessian 矩阵的第 j 列是梯度 $\dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} = \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$ 第 j 个分量的梯度，即

$$\left[\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}\right]_{i,j} = \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial x_i \partial x_j} \tag{5.1.65}$$

或写作

$$\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = \begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_n} \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_1} & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_n \partial x_n} \end{bmatrix} \tag{5.1.66}$$

因此，Hessian 矩阵可以用二步法求出：

(1) 求实值函数 $f(\boldsymbol{x})$ 关于向量变元 $\boldsymbol{x}$ 的偏导数，得到实值函数的梯度 $\dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$。

(2) 再求梯度 $\dfrac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}$ 相对于 $1 \times n$ 行向量 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 的偏导数，得到梯度的梯度即 Hessian 矩阵。

根据以上步骤，容易得到 Hessian 矩阵的下列公式。

(1) 对于 $n \times 1$ 常数向量 $\boldsymbol{a}$，有

$$\boxed{\frac{\partial^2 \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = \boldsymbol{O}_{n \times n}} \tag{5.1.67}$$

(2) 若 $\boldsymbol{A}$ 是 $n \times n$ 矩阵，则

$$\boxed{\frac{\partial^2 \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = \boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}} \tag{5.1.68}$$

(3) 令 $\boldsymbol{x}$ 为 $n \times 1$ 向量，$\boldsymbol{a}$ 为 $m \times 1$ 常数向量，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别为 $m \times n$ 和 $m \times m$ 常数矩阵，且 $\boldsymbol{B}$ 为对称矩阵，则

$$\boxed{\frac{\partial^2 (\boldsymbol{a} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{B} (\boldsymbol{a} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = 2\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{B} \boldsymbol{A}} \tag{5.1.69}$$

(4) 若 $\boldsymbol{A}$ 是一个与向量 $\boldsymbol{x}$ 无关的矩阵，而 $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})$ 是与向量 $\boldsymbol{x}$ 的元素有关的列向量，则

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial^2 [\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x} \partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = & \frac{\partial [\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}} (\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) \frac{\partial \boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} + \\ & \left([\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}} (\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) \otimes \boldsymbol{I}_n \right) \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} \left[\mathrm{vec} \left(\frac{\partial [\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}} \right) \right] \end{aligned}} \tag{5.1.70}$$

5.1.7 局部极小点的条件

根据定义确定某个点 $\boldsymbol{x}_*$ 是否为目标函数的局部极小点，需要将目标函数在该点的取值与函数在该点邻域里所有点的取值进行比较。这显然是不实际的做法。然而，当目标函数 f 光滑时，却存在很多有效和实际的方法能够识别一个点是否为局部极小点。特别地，如果 f 是二次连续可微分的话，直接通过检验梯度 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*)$ 和 Hessian 矩阵 $\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*)$，即可判断点 $\boldsymbol{x}_*$ 是否为局部极小点 (甚至是严格局部极小点)。

若 $(\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x}$ 很小，则函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的 Taylor 级数展开为

$$f(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) + (\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) + \frac{1}{2}(\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x})\Delta\boldsymbol{x} \tag{5.1.71}$$

下面介绍判断一个局部极小点的一阶条件和二阶条件 [337]。

定理 5.1.2 (一阶必要条件) 若 $\boldsymbol{x}_*$ 是一个局部极小点，并且 $f(\boldsymbol{x})$ 在点 $\boldsymbol{x}_*$ 的一个开邻域 $\Delta\boldsymbol{x}$ 里是连续可微分的，则 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) = \mathbf{0}$。

证明 设邻域 $\Delta\boldsymbol{x}$ 足够小，以至于 $(\Delta\boldsymbol{x})^2$ 可以忽略。此时，函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的 Taylor 级数展开为

$$f(\boldsymbol{x}+\Delta\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}) + (\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})$$

使用反证法。假设 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*) \neq \mathbf{0}$，则至少可以在邻域内找到一个方向 $\Delta\boldsymbol{x} = -\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*)$，使得

$$(\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*) = -\|\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*)\|^2 < 0$$

从而有

$$f(\boldsymbol{x}_*+\Delta\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}_*) + (\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*) < f(\boldsymbol{x}_*)$$

因此，点 $\boldsymbol{x}_*$ 不是局部极小点，与定理的假设条件相矛盾。这就是说，假设 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*) \neq \mathbf{0}$ 不能成立。 ■

满足一阶必要条件 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*) = \mathbf{0}$ 的点 $\boldsymbol{x}_*$ 称为平稳点。

定理 5.1.3 (二阶必要条件) 若 $\boldsymbol{x}_*$ 是 $f(\boldsymbol{x})$ 的局部极小点，并且 $\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}_*$ 的开邻域 $\Delta\boldsymbol{x}$ 内连续，则

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*) = \mathbf{0} \quad 和 \quad \nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*) \geqslant 0 \tag{5.1.72}$$

式中，$\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*) \geqslant 0$ 表示 Hessian 矩阵 $\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*)$ 半正定。

证明 由定理 5.1.2 知，梯度 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*) = \mathbf{0}$，故

$$f(\boldsymbol{x}_*+\Delta\boldsymbol{x}) = f(\boldsymbol{x}_*) + (\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x})\Delta\boldsymbol{x} \tag{5.1.73}$$

使用反证法，令 $\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*)$ 不是半正定的，则存在一个 $\Delta\boldsymbol{x}$，使得 $(\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*)\Delta\boldsymbol{x} < 0$。将这一结果代入式 (5.1.73)，立即有 $f(\boldsymbol{x}_*+\Delta\boldsymbol{x}) < f(\boldsymbol{x}_*)$。这表明，$\boldsymbol{x}_*$ 不是局部极小点，与定理的假设条件相矛盾。因此，“$\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x})$ 不是半正定的”这一假设不能成立。 ■

定理 5.1.4 (二阶充分条件) 假设 $\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}_*$ 的开邻域内连续，并且

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*) = \mathbf{0}, \quad \nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*) > 0 \tag{5.1.74}$$

则 $\boldsymbol{x}_*$ 是函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的严格局部极小点。式中，$\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*) > 0$ 表示 Hessian 矩阵 $\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*)$ 正定。

证明 由梯度 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}_*) = \boldsymbol{0}$ 知，式 (5.1.73) 仍然成立。又由于假设 $\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}_*)$ 正定，即 $(\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x})\Delta\boldsymbol{x} > 0$，故式 (5.1.73) 立即给出结果 $f(\boldsymbol{x}_* + \Delta\boldsymbol{x}) > f(\boldsymbol{x}_*)$，即 $\boldsymbol{x}_*$ 是函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的严格局部极小点。 ■

应当注意，定理 5.1.3 中的二阶充分条件并不是必要条件：有的点 $\boldsymbol{x}_*$ 可能是严格局部极小点，但是在该点的 Hessian 矩阵却不是正定的。例如，观察知，点 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 是函数 $f(\boldsymbol{x}) = (\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})^2$ 的严格局部极小点，但是 Hessian 矩阵

$$\frac{\mathrm{d}^2 f(\boldsymbol{x})}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\boldsymbol{x}\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})^2 = 12\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$$

在严格局部极小点 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 为零矩阵，不是正定矩阵。

定理 5.1.5 凸函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的任何局部极小点 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 都是该函数的一个全局极小点。若凸函数 $f(\boldsymbol{x})$ 是可微分的，则满足 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ 的平稳点 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 是 $f(\boldsymbol{x})$ 的一个全局极小点。

证明 与定理 5.1.1 的证明相类似。 ■

例 5.1.8 考查实目标函数 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，其中，$\boldsymbol{A}$ 是一个对称和正定的矩阵。当 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵时，容易求得该目标函数的梯度为 $\nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) = 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$。令 $2\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，得唯一的稳定点 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$。进一步地，又可求得目标函数的 Hessian 矩阵 $\nabla_{\boldsymbol{x}}^2 f(\boldsymbol{x}) = 2\boldsymbol{A}$。由于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 已知是正定的，故 Hessian 矩阵在 $\boldsymbol{x}$ 的任何点都是正定的。根据定理 5.1.4 知，原点 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 是目标函数的严格局部极小点。由于二次型目标函数 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 是严格凸函数，所以根据定理 5.1.5 知，这个局部极小点 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 就是目标函数的全局极小点。

5.2 矩阵微分及其在最优化中的应用

上一节介绍了如何根据定义，求实值函数的梯度矩阵以及 Hessian 矩阵。可以看出，对于矩阵的行列式这类实值函数，按照定义求其梯度矩阵，是比较麻烦的。如果进一步希望求出行列式函数的 Hessian 矩阵，则更加费事。不难想象，要是遇到矩阵的对数等，计算梯度矩阵和 Hessian 矩阵就越发复杂。那么，这一困难能否克服呢? 答案是肯定的，因为矩阵微分为标量函数、向量函数和矩阵函数的梯度矩阵与 Hessian 矩阵的计算，提供了非常有效的数学工具。本节将介绍矩阵微分的有关理论、方法及其在最优化问题中的有趣应用 [296]。

5.2.1 矩阵微分与偏导

矩阵微分是实函数微分对矩阵函数的推广。在微积分中，标量函数 $\phi(c)$ 的导数 $\phi'(c)$ 定义为

$$\phi'(c) = \lim_{u\to 0}\frac{\phi(c+u)-\phi(c)}{u} = \phi'(c) \tag{5.2.1}$$

它又可等价写作

$$\phi(c+u)=\phi(c)+u\phi'(c)+r_c(u) \tag{5.2.2}$$

这就是有名的一阶 Taylor 公式。式中，$r_c(u)$ 称为函数 $\phi(c)$ 的留数，即有

$$\lim_{u\to 0}\frac{r_c(u)}{u}=0 \tag{5.2.3}$$

如果把 c 和 u 分别想象成固定点和增量，则函数的增量 $\phi(c+u)-\phi(c)$ 由两部分构成：与导数成正比的分量 $u\phi'(c)$ 和“误差”分量。若误差越小，则函数 $\phi(c+u)=\phi(c)+u\phi'(c)$ 越准确。于是，可以使用

$$\mathrm{d}\phi(c;u)=u\phi'(c) \tag{5.2.4}$$

定义函数 ϕ 在点 c 处 (增量为 u) 的一阶微分。注意，符号 $\phi(c;u)$ 强调 c 为一固定点，在该点存在导数 $\phi'(c)$；而 u 是 c 处的增量。

将上面的标量推广到向量，即可引出向量函数的微分。

定义 5.2.1 [296, p.82] 令 $\boldsymbol{c}$ 和 $\boldsymbol{u}$ 是两个 $n\times 1$ 向量，其中，$\boldsymbol{c}$ 是 $m\times 1$ 向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 的向量变元，而 $\boldsymbol{u}$ 是 R^n 中的一个点，并且 $\|\boldsymbol{u}\|_2<r$。若存在一个 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，它与 $\boldsymbol{c}$ 有关，但与 $\boldsymbol{u}$ 无关，并且使得

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}+\boldsymbol{u})=\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})+\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u}+r_c(\boldsymbol{u}) \tag{5.2.5}$$

对所有具有 $\|\boldsymbol{u}\|_2<r$ 的 $n\times 1$ 实向量 $\boldsymbol{u}$ 恒成立，以及

$$\lim_{\boldsymbol{u}\to\boldsymbol{0}}\frac{r_c(\boldsymbol{u})}{\|\boldsymbol{u}\|_2}=0 \tag{5.2.6}$$

则称函数 f 在向量点 $\boldsymbol{c}$ 是可微分的 (differentiable)，称 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})$ 是函数 f 在 $\boldsymbol{c}$ 的一阶导数，并称 $m\times 1$ 向量

$$\mathrm{d}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c};\boldsymbol{u})=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u} \tag{5.2.7}$$

是 f 在 $\boldsymbol{c}$ 的一阶微分向量。

注意，在上述定义以及以后的叙述中，应将符号 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 和 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})$ 当作一个整体符号看待，分别理解为以向量 $\boldsymbol{c}$ 作变元的向量函数和只与向量 $\boldsymbol{c}$ 有关的矩阵。

现在考虑另外一个向量点 $\boldsymbol{c}+t\boldsymbol{e}_j$，其中，$\boldsymbol{e}_j$ 是一个仅第 j 个元素为 1，其他元素皆为零的 $n\times 1$ 基本向量；t 为非零的标量。换言之，向量 $\boldsymbol{c}+t\boldsymbol{e}_j$ 与 $\boldsymbol{c}$ 仅第 j 个元素不同，其他元素皆相同。当 t 足够小时，极限

$$D_j\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})\overset{\text{def}}{=}\lim_{t\to 0}\frac{\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c}+t\boldsymbol{e}_j)-\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})}{t} \tag{5.2.8}$$

称为向量函数 $\boldsymbol{f}$ 的第 i 个元素 (标量) 相对于向量变元 $\boldsymbol{c}$ 的第 j 个元素 (标量) 的偏导。

根据以上定义，n 个偏导 (标量) 的排列 $[D_1\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c}),D_2\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c}),\cdots,D_n\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})]$ 定义了向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 的第 i 个元素 $\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})$ 相对于 $1\times n$ 行向量 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}$ 的偏导向量，即有

$$\frac{\partial\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})}{\partial\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}}=[D_1\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c}),D_2\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c}),\cdots,D_n\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})] \tag{5.2.9}$$

于是，列向量 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}) = [\boldsymbol{f}_1(\boldsymbol{c}), \boldsymbol{f}_2(\boldsymbol{c}), \cdots, \boldsymbol{f}_m(\boldsymbol{c})]^{\mathrm{T}}$ 相对于行向量 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}} = [c_1, c_2, \cdots, c_n]$ 的偏导矩阵为 $m \times n$ 矩阵，定义为

$$\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})] \overset{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} \dfrac{\partial \boldsymbol{f}_1(\boldsymbol{c})}{\partial \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}} \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{f}_2(\boldsymbol{c})}{\partial \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}} \\ \vdots \\ \dfrac{\partial \boldsymbol{f}_m(\boldsymbol{c})}{\partial \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} D_1\boldsymbol{f}_1(\boldsymbol{c}) & D_2\boldsymbol{f}_1(\boldsymbol{c}) & \cdots & D_n\boldsymbol{f}_1(\boldsymbol{c}) \\ D_1\boldsymbol{f}_2(\boldsymbol{c}) & D_2\boldsymbol{f}_2(\boldsymbol{c}) & \cdots & D_n\boldsymbol{f}_2(\boldsymbol{c}) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ D_1\boldsymbol{f}_m(\boldsymbol{c}) & D_2\boldsymbol{f}_m(\boldsymbol{c}) & \cdots & D_n\boldsymbol{f}_m(\boldsymbol{c}) \end{bmatrix} \tag{5.2.10}$$

称为向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 在 $\boldsymbol{c}$ 的 Jocobian 矩阵，其行列式称为 Jacobian 行列式。

下面分析向量函数的导数矩阵 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})$ 和 Jacobian 矩阵 $\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})]$ 的性能：

(1) 导数矩阵 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})$ 的唯一性；

(2) 偏导函数 $D_j\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})$ 的存在性；

(3) Jacobian 矩阵 $\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})]$ 的唯一可辨识性。

定理 5.2.1 ~ 5.2.3 分别给出了以上三个问题的答案。

定理 5.2.1 令向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 在点 $\boldsymbol{c}$ 处可微分。若存在两个导数矩阵 $\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{c})$ 和 $\boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{c})$ 满足 $\mathrm{d}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c};\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{A}_i(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u}, i = 1, 2$，则 $\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{c}) = \boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{c})$。

证明 [296, p.84] 根据可微分性的定义，有

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}+\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}) + \boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u} + \boldsymbol{r}_{c1}(\boldsymbol{u}) \tag{1}$$

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}+\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}) + \boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u} + \boldsymbol{r}_{c2}(\boldsymbol{u}) \tag{2}$$

式中，$\boldsymbol{r}_{c1}(\boldsymbol{u})/\|\boldsymbol{u}\|_2$ 和 $\boldsymbol{r}_{c2}(\boldsymbol{u})/\|\boldsymbol{u}\|_2$ 均趋于零，若 $\boldsymbol{u} \to \boldsymbol{0}$。令 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{c}) = \boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{c}) - \boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{c})$。式 (1) 减去式 (2)，得

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{r}_{c1}(\boldsymbol{u}) - \boldsymbol{r}_{c2}(\boldsymbol{u})$$

故有

$$\frac{\boldsymbol{B}(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u}}{\|\boldsymbol{u}\|_2} \to \boldsymbol{0}, \qquad \boldsymbol{u} \to \boldsymbol{0}$$

对于给定的增量向量 $\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}$，由上式立即得

$$\frac{\boldsymbol{B}(\boldsymbol{c})(t\boldsymbol{u})}{\|t\boldsymbol{u}\|_2} \to 0, \qquad t \to 0 \tag{3}$$

因此，式 (3) 的左边与 t 无关，从而 $\boldsymbol{B}(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$ 对所有向量 $\boldsymbol{u} \in R^n$ 成立。换言之，$\boldsymbol{A}_1(\boldsymbol{c}) = \boldsymbol{A}_2(\boldsymbol{c})$。 ■

定理 5.2.1 表明，一阶导数矩阵 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})$ 是唯一确定的。

定理 5.2.2 若向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 在点 $\boldsymbol{c}$ 可微分，则所有偏导 $D_j\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c}), i = 1, 2, \cdots, m, j = 1, 2, \cdots, n$ 存在。

证明 [296, p.86] 由于 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 在 $\boldsymbol{c}$ 可微分，故存在一个 $m \times n$ 实矩阵 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})$ 使得对于所有 $\|\boldsymbol{u}\|_2 < r$，恒有

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}+\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}) + \boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u} + \boldsymbol{r}_c(\boldsymbol{u}) \tag{1}$$

式中

$$\boldsymbol{r}_c(\boldsymbol{u})/\|\boldsymbol{u}\|_2 \to \boldsymbol{0}, \qquad \boldsymbol{u} \to \boldsymbol{0}$$

因为式 (1) 对所有 $\|\boldsymbol{u}\|_2 < r$ 成立，所以式 (1) 自然对特定的选择 $\boldsymbol{u} = t\boldsymbol{e}_j$ $(|t| < r)$ 也成立。于是，有

$$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}+t\boldsymbol{e}_j) = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}) + t\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})\boldsymbol{e}_j + \boldsymbol{r}_c(t\boldsymbol{e}_j) \tag{2}$$

式中，$\dfrac{\boldsymbol{r}_c(t\boldsymbol{e}_j)}{t} \to 0$，若 $t \to 0$。式 (2) 两边同除以 t，并令 $t \to 0$，则矩阵 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})$ 的元素

$$a_{ij}(c) = \lim_{t\to 0} \frac{\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c}+t\boldsymbol{e}_j) - \boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})}{t}$$

由于 $a_{ij}(c)$ 存在，故上式右边的极限也存在。比较上式与式 (5.2.8)，立即知偏导 $D_j\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})$ 存在。 ■

综合定理 5.2.1 和定理 5.2.2，立即得到下面的重要结果。

定理 5.2.3 [296, p.87] 令向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 在 $\boldsymbol{c}$ 可微分，并令 $\boldsymbol{u}$ 是一 $n \times 1$ 实向量，则

$$\mathrm{d}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c};\boldsymbol{u}) = (\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})])\,\boldsymbol{u} \tag{5.2.11}$$

式中，$\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})]$ 为 $m \times n$ 矩阵，其 (i,j) 元素为 $D_j\boldsymbol{f}_i(\boldsymbol{c})$，它是向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 的第 i 个元素关于向量变元 $\boldsymbol{c}$ 的第 j 个元素的偏导。反之，若 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})$ 是满足

$$\mathrm{d}f(\boldsymbol{c};\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{c})\boldsymbol{u} \tag{5.2.12}$$

的矩阵，则 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{c}) = \boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})]$。

式 (5.2.11) 中的 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})]$ 实质就是向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 在 $\boldsymbol{c}$ 的 Jacobian 矩阵，由式 (5.2.10) 定义。

$m \times n$ 维 Jacobian 矩阵的转置称为向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 在点 $\boldsymbol{c}$ 的梯度矩阵，记为 $\nabla\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$，即有

$$\nabla\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})])^{\mathrm{T}} \tag{5.2.13}$$

特别地，若 $m = 1$，即对于以 $n \times 1$ 向量 $\boldsymbol{c}$ 为变元的标量函数 $f(\boldsymbol{c})$，Jacobian 矩阵 $\boldsymbol{D}[f(\boldsymbol{c})]$ 退化为 $1 \times n$ 行向量，其转置给出 $n \times 1$ 梯度向量 $\nabla f(\boldsymbol{c})$。

以上结果可以归纳为求 $m \times 1$ 向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 的梯度矩阵 $\nabla\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 的方法如下：

(1) 求向量函数 $f(\boldsymbol{c})$ 的微分 $\mathrm{d}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c};\boldsymbol{u}) = [\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})]\boldsymbol{u}$，得到 Jacobian 矩阵 $\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})]$。

(2) 将 Jacobian 矩阵转置，得到梯度矩阵 $\nabla\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})])^{\mathrm{T}}$。

在求向量函数的微分时，经常会遇到向量函数为复合函数的情况。此时，下面的链式法则 (chain rule) 和 Cauchy 法则起着关键的作用。

定理5.2.4 (链式法则)[296, p.91] 令向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 在 $\boldsymbol{c}$ 可微分，并且向量函数 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{b})$ 在 $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 可微分，则复合向量函数

$$\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})) \tag{5.2.14}$$

在 $\boldsymbol{c}$ 可微分，并且

$$\boldsymbol{D}\boldsymbol{h}(\boldsymbol{c}) = (\boldsymbol{D}[\boldsymbol{g}(\boldsymbol{b})])\,(\boldsymbol{D}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})]) \tag{5.2.15}$$

定理 5.2.5 [296, p.93] 若向量函数 $\boldsymbol{f}$ 在点 $\boldsymbol{c}$ 可微分，且 $\boldsymbol{g}$ 在 $\boldsymbol{b} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{c})$ 可微分，则复合函数 $\boldsymbol{h}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{g}(\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x}))$ 的微分由下式给出：

$$\mathrm{d}\boldsymbol{h}(\boldsymbol{c};\boldsymbol{u}) = \mathrm{d}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{b};\mathrm{d}\boldsymbol{f}(\boldsymbol{c};\boldsymbol{u})), \quad \forall\, \boldsymbol{u} \in R^n \tag{5.2.16}$$

下面通过两个例子说明如何分别求标量函数的微分和矩阵函数的微分矩阵。

例 5.2.1 考虑标量函数 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{U})$ 的微分，得

$$\mathrm{d}(\mathrm{tr}\,\boldsymbol{U}) = \mathrm{d}\left(\sum_{i=1}^{n} u_{ii}\right) = \sum_{i=1}^{n} \mathrm{d}u_{ii} = \mathrm{tr}(\mathrm{d}\boldsymbol{U})$$

即有

$$\mathrm{d}(\mathrm{tr}\,\boldsymbol{U}) = \mathrm{tr}(\mathrm{d}\,\boldsymbol{U}) \tag{5.2.17}$$

例 5.2.2 考虑矩阵乘积 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{V}$ 的微分矩阵，有

$$\begin{aligned}
[\mathrm{d}(\boldsymbol{U}\boldsymbol{V})]_{ij} &= \mathrm{d}\left([\boldsymbol{U}\boldsymbol{V}]_{ij}\right) \\
&= \mathrm{d}\left(\sum_k u_{ik}v_{kj}\right) = \sum_k \mathrm{d}(u_{ik}v_{kj}) \\
&= \sum_k \left[(\mathrm{d}u_{ik})v_{kj} + u_{ik}\mathrm{d}v_{kj}\right] \\
&= \sum_k (\mathrm{d}u_{ik})v_{kj} + \sum_k u_{ik}\mathrm{d}v_{kj} \\
&= [(\mathrm{d}\boldsymbol{U})\boldsymbol{V}]_{ij} + [\boldsymbol{U}\mathrm{d}\boldsymbol{V}]_{ij}
\end{aligned}$$

从而得

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{U}\boldsymbol{V}) = (\mathrm{d}\boldsymbol{U})\boldsymbol{V} + \boldsymbol{U}\mathrm{d}\boldsymbol{V} \tag{5.2.18}$$

令 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 为常数矩阵，并且 $\boldsymbol{U}, \boldsymbol{V}, \boldsymbol{W}, \boldsymbol{X}$ 为矩阵函数。下面汇总了矩阵微分的常用法则 [296, pp.148~154]。

(1) 常数矩阵的微分矩阵为零矩阵，即

$$\mathrm{d}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{O} \tag{5.2.19}$$

(2) 常数 α 与矩阵函数 $\boldsymbol{U}$ 的乘积的微分矩阵，即

$$\mathrm{d}(\alpha\boldsymbol{U}) = \alpha\mathrm{d}\boldsymbol{U} \tag{5.2.20}$$

(3) 矩阵转置的微分矩阵等于原矩阵的微分矩阵的转置，即

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}) = (\mathrm{d}\boldsymbol{U})^{\mathrm{T}} \tag{5.2.21}$$

(4) 两个矩阵函数的和 (差) 的微分矩阵为

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{U} \pm \boldsymbol{V}) = \mathrm{d}\boldsymbol{U} \pm \mathrm{d}\boldsymbol{V} \tag{5.2.22}$$

(5) 常数矩阵与矩阵函数乘积的微分矩阵为

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{AXB}) = \boldsymbol{A}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{B} \tag{5.2.23}$$

(6) 矩阵函数乘积的微分矩阵为

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{UV}) = (\mathrm{d}\boldsymbol{U})\boldsymbol{V} + \boldsymbol{U}(\mathrm{d}\boldsymbol{V}) \tag{5.2.24}$$

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{UVW}) = (\mathrm{d}\boldsymbol{U})\boldsymbol{VW} + \boldsymbol{U}(\mathrm{d}\boldsymbol{V})\boldsymbol{W} + \boldsymbol{UV}(\mathrm{d}\boldsymbol{W}) \tag{5.2.25}$$

特别地，若 $\boldsymbol{A}$ 为常数矩阵，则

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}) = (\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{AX}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{XA}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}} \tag{5.2.26}$$

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}) = (\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX} + \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{X} \tag{5.2.27}$$

(7) 矩阵函数的 Kronecker 积的微分矩阵为

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{U}\otimes\boldsymbol{V}) = (\mathrm{d}\boldsymbol{U})\otimes\boldsymbol{V} + \boldsymbol{U}\otimes\mathrm{d}\boldsymbol{V} \tag{5.2.28}$$

(8) 矩阵函数的 Hadamard 积的微分矩阵，为

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{U}\odot\boldsymbol{V}) = (\mathrm{d}\boldsymbol{U})\odot\boldsymbol{V} + \boldsymbol{U}\odot\mathrm{d}\boldsymbol{V} \tag{5.2.29}$$

(9) 向量化函数 $\mathrm{vec}(\boldsymbol{U})$ 的微分矩阵等于 $\boldsymbol{U}$ 的微分矩阵的向量化函数，即

$$\mathrm{d}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{U})) = \mathrm{vec}(\mathrm{d}\boldsymbol{U}) \tag{5.2.30}$$

(10) 行列式的微分为

$$\mathrm{d}|\boldsymbol{X}| = |\boldsymbol{X}|\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X}) \tag{5.2.31}$$

(11) 矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的迹的微分 $\mathrm{d}(\mathrm{tr}\boldsymbol{U})$ 等于微分矩阵 $\mathrm{d}\boldsymbol{U}$ 的迹 $\mathrm{tr}(\mathrm{d}\boldsymbol{U})$，即有

$$\mathrm{d}(\mathrm{tr}(\boldsymbol{U})) = \mathrm{tr}(\mathrm{d}\boldsymbol{U}) \tag{5.2.32}$$

$$\mathrm{d}(\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})) = 2\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{X}) \tag{5.2.33}$$

(12) 逆矩阵的微分矩阵为

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{X}^{-1}) = -\boldsymbol{X}^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1} \tag{5.2.34}$$

(13) Moore-Penrose 逆矩阵的微分矩阵为

$$\begin{aligned}\mathrm{d}(\boldsymbol{X}^{\dagger}) = &-\boldsymbol{X}^{\dagger}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{\dagger} + \boldsymbol{X}^{\dagger}(\boldsymbol{X}^{\dagger})^{\mathrm{T}}(\mathrm{d}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{XX}^{\dagger}) + \\ &(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{X}^{\dagger}\boldsymbol{X})(\mathrm{d}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{X}^{\dagger})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\dagger}\end{aligned} \tag{5.2.35}$$

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{X}^{\dagger}\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{X}^{\dagger}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{X}^{\dagger}\boldsymbol{X}) + \left(\boldsymbol{X}^{\dagger}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{X}^{\dagger}\boldsymbol{X})\right)^{\mathrm{T}} \tag{5.2.36}$$

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{XX}^{\dagger}) = (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{XX}^{\dagger})(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{\dagger} + \left((\boldsymbol{I}-\boldsymbol{XX}^{\dagger})(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{\dagger}\right)^{\mathrm{T}} \tag{5.2.37}$$

(14) 矩阵对数的微分矩阵为

$$\mathrm{d}\log\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X} \tag{5.2.38}$$

$$\mathrm{d}\log(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}) = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}[(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX} + \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{X}] \tag{5.2.39}$$

5.2.2 标量函数的梯度

以上分析表明，矩阵函数的导数可以利用矩阵微分计算，而矩阵微分的计算具有简单易行的特点。作为具体的应用，现在讨论如何利用矩阵微分，求一个标量函数的梯度矩阵。

下面的引理总结了由矩阵微分求标量函数的偏导 (即梯度) 的两个重要关系。

引理 5.2.1 [296] 若矩阵的标量函数 $f(\boldsymbol{X})$ 在 $m \times n$ 矩阵点 $\boldsymbol{X}$ 可微分，则下列关系成立：

$$\mathrm{d}f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{X} \ \Leftrightarrow\ \nabla f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \tag{5.2.40}$$

$$\mathrm{d}f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{X}) \ \Leftrightarrow\ \nabla f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \tag{5.2.41}$$

式中，$\boldsymbol{A}$ 有可能与变元矩阵 $\boldsymbol{X}$ 有关。

1. 向量的标量函数

向量的标量函数有两个典型的例子：两个向量的内积 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 和二次型函数 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$。

令 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$，易知

$$\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{x} \tag{5.2.42}$$

从而得 Jacobian 矩阵 $\boldsymbol{D}f(\boldsymbol{c}) = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}$。因此，标量函数 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 关于变元向量 $\boldsymbol{x}$ 的梯度为

$$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \frac{\partial \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = (\boldsymbol{D}[f(\boldsymbol{c})])^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{a} \tag{5.2.43}$$

考察二次型函数 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，其中，$\boldsymbol{A}$ 是一个正方的常数矩阵。于是，利用 Cauchy 法则，有

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}f(\boldsymbol{x}) &= \mathrm{d}(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) = (\mathrm{d}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\
&= [\mathrm{d}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}]^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{x} + \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{x} \\
&= \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\mathrm{d}\boldsymbol{x}
\end{aligned}$$

由引理 5.2.1 直接得二次型函数 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 关于变元向量 $\boldsymbol{x}$ 的梯度向量为

$$\nabla(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) = \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = (\boldsymbol{D}[f(\boldsymbol{x})])^{\mathrm{T}} = (\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x} \tag{5.2.44}$$

显然，若 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，则

$$\nabla(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}) = \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} = 2\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \qquad \boldsymbol{A}\ \text{为对称矩阵} \tag{5.2.45}$$

2. 矩阵的标量函数：迹

利用微分矩阵的性质 (5.2.32) 易知

$$\mathrm{d}\,\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\mathrm{d}\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{I}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$$

因此，由引理 5.2.1 得迹函数 $\text{tr}(\boldsymbol{X})$ 关于 $\boldsymbol{X}$ 的梯度矩阵为

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} = \boldsymbol{I}^T = \boldsymbol{I} \tag{5.2.46}$$

对于 $\text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X})$，注意到 $\text{tr}(\boldsymbol{A}^\text{T}\boldsymbol{B}) = \text{tr}(\boldsymbol{B}^\text{T}\boldsymbol{A})$，有

$$\begin{aligned}
\text{d}\,\text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X}) &= \text{tr}\left(\text{d}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X})\right) = \text{tr}\left((\text{d}\boldsymbol{X})^\text{T}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{X}^\text{T}\text{d}\boldsymbol{X}\right) \\
&= \text{tr}\left((\text{d}\boldsymbol{X})^\text{T}\boldsymbol{X}\right) + \text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\text{d}\boldsymbol{X}) \\
&= \text{tr}\left(2\boldsymbol{X}^\text{T}\text{d}\boldsymbol{X}\right)
\end{aligned}$$

故由引理 5.2.1 得 $\text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X})$ 关于 $\boldsymbol{X}$ 的梯度矩阵为

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} = (2\boldsymbol{X}^\text{T})^\text{T} = 2\boldsymbol{X} \tag{5.2.47}$$

考虑三个矩阵乘积的迹函数 $\text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X})$，其微分

$$\begin{aligned}
\text{d}\,\text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}) &= \text{tr}\left(\text{d}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X})\right) \\
&= \text{tr}\left((\text{d}\boldsymbol{X})^\text{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{A}\text{d}\boldsymbol{X}\right) \\
&= \text{tr}\left((\text{d}\boldsymbol{X})^\text{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\right) + \text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{A}\text{d}\boldsymbol{X}) \\
&= \text{tr}\left((\boldsymbol{A}\boldsymbol{X})^\text{T}\text{d}\boldsymbol{X}\right) + \text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{A}\text{d}\boldsymbol{X}) \\
&= \text{tr}\left(\boldsymbol{X}^\text{T}(\boldsymbol{A}^\text{T} + \boldsymbol{A})\text{d}\boldsymbol{X}\right)
\end{aligned}$$

从而得梯度矩阵

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{X}^\text{T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X})}{\partial \boldsymbol{X}} = [\boldsymbol{X}^\text{T}(\boldsymbol{A}^\text{T} + \boldsymbol{A})]^\text{T} = (\boldsymbol{A}^\text{T} + \boldsymbol{A})\boldsymbol{X} \tag{5.2.48}$$

再看一个包含了逆矩阵的迹函数 $\text{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1})$。计算得

$$\begin{aligned}
\text{d}\,\text{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1}) &= \text{tr}\left(\text{d}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1})\right) = \text{tr}\left(\boldsymbol{A}\text{d}\boldsymbol{X}^{-1}\right) \\
&= -\text{tr}\left(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1}(\text{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1}\right) \\
&= -\text{tr}\left(\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1}\text{d}\boldsymbol{X}\right)
\end{aligned}$$

由此得梯度矩阵

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1})}{\partial \boldsymbol{X}} = -(\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1})^\text{T} \tag{5.2.49}$$

表 5.2.1 汇总了几种典型的迹函数的微分矩阵与梯度矩阵的对应关系。

3. 矩阵的标量函数: 行列式

定理 5.2.6 [296] $n \times n$ 矩阵的行列式 $|\boldsymbol{X}|$ 在 $\boldsymbol{X}$ 的微分由下式给出：

$$\text{d}|\boldsymbol{X}| = |\boldsymbol{X}|\text{tr}(\boldsymbol{X}^{-1}\text{d}\boldsymbol{X}) = \text{tr}(|\boldsymbol{X}|\boldsymbol{X}^{-1}\text{d}\boldsymbol{X}) \tag{5.2.50}$$

表 5.2.1 几种迹函数的微分矩阵与梯度矩阵的对应关系[296]

迹函数 $f(\boldsymbol{X})$	微分矩阵 $\mathrm{d}f(\boldsymbol{X})$	梯度矩阵 $\partial f(\boldsymbol{X})/\partial \boldsymbol{X}$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{X})$	$\mathrm{tr}(\boldsymbol{I}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$\boldsymbol{I}$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})$	$2\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$2\boldsymbol{X}$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X})$	$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^2)$	$2\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$2\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X})$	$\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)$	$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{X}$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})$	$\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)$	$\boldsymbol{X}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X})$	$\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}+\boldsymbol{X}\boldsymbol{A})\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)$	$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1})$	$-\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)$	$-(\boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{-1})^{\mathrm{T}}$
$\mathrm{tr}((\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B})$	$\mathrm{tr}((\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A})\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A})^{\mathrm{T}}$
$\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})$	$\mathrm{tr}((\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}$

证明 令 x_{ij} 是矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的元素，c_{ij} 是 x_{ij} 的余子式。由行列式定义知

$$|\boldsymbol{X}|=\sum_{i=1}^{n}c_{ij}x_{ij}$$

由于 x_{ij} 的余子式 c_{ij} 与 x_{ij} 无关，求上式关于 x_{ij} 的偏导，立即有 $\dfrac{\partial|\boldsymbol{X}|}{\partial x_{ij}}=c_{ij}$。由这些偏导，易得微分

$$\mathrm{d}|\boldsymbol{X}|=\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}c_{ij}\mathrm{d}x_{ij}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\#}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$$

式中，$\boldsymbol{X}^{\#}$ 是矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的伴随矩阵。由于 $\boldsymbol{X}^{-1}=\dfrac{\boldsymbol{X}^{\#}}{|\boldsymbol{X}|}$，故立即有

$$\mathrm{d}|\boldsymbol{X}|=\mathrm{tr}(|\boldsymbol{X}|\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X})=|\boldsymbol{X}|\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$$

这就是式 (5.2.50)。 ■

由定理 5.2.6 和引理 5.2.1，立即得行列式的梯度矩阵为

$$\frac{\partial|\boldsymbol{X}|}{\partial\boldsymbol{X}}=|\boldsymbol{X}|(\boldsymbol{X}^{-1})^{\mathrm{T}}=|\boldsymbol{X}|\boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}\tag{5.2.51}$$

有了定理 5.2.6 和引理 5.2.1，求矩阵乘积的行列式的微分及梯度矩阵便变得容易。下面试举几例。

考虑 $\boldsymbol{X}^2$ 的行列式。由定理 5.2.6 知

$$\mathrm{d}|\boldsymbol{X}^2|=\mathrm{d}|\boldsymbol{X}|^2=2|\boldsymbol{X}|\mathrm{d}|\boldsymbol{X}|=2|\boldsymbol{X}|^2\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)\tag{5.2.52}$$

应用引理 5.2.1，立即得

$$\frac{\partial|\boldsymbol{X}|^2}{\partial\boldsymbol{X}}=2|\boldsymbol{X}|^2(\boldsymbol{X}^{-1})^{\mathrm{T}}=2|\boldsymbol{X}|^2\boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}\tag{5.2.53}$$

令 $\boldsymbol{X} \in R^{m\times n}$，并且 $\text{rank}(\boldsymbol{X}) = m$ 即 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}$ 可逆，则对于矩阵乘积 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}$ 的行列式，有

$$\begin{aligned}
\text{d}|\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}| &= |\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}|\text{tr}\left((\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}\text{d}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})\right) \\
&= |\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}|\text{tr}\left((\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}\left[(\text{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{\text{T}} + \boldsymbol{X}(\text{d}\boldsymbol{X})^{\text{T}}\right]\right) \\
&= |\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}|\left[\text{tr}\left((\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}(\text{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{\text{T}}\right) + \text{tr}\left((\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}\boldsymbol{X}(\text{d}\boldsymbol{X})^{\text{T}}\right)\right] \\
&= |\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}|\left[\text{tr}\left(\boldsymbol{X}^{\text{T}}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}\text{d}\boldsymbol{X}\right) + \text{tr}\left((\text{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{\text{T}}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}\right)\right] \\
&= |\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}|\left[\text{tr}\left(\boldsymbol{X}^{\text{T}}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}\text{d}\boldsymbol{X}\right) + \text{tr}\left(\boldsymbol{X}^{\text{T}}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}\text{d}\boldsymbol{X}\right)\right] \\
&= \text{tr}\left(2|\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}|\boldsymbol{X}^{\text{T}}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}\text{d}\boldsymbol{X}\right)
\end{aligned}$$

式中，使用了迹的性质公式 $\text{tr}(\boldsymbol{AB}) = \text{tr}(\boldsymbol{BA})$ 和 $\text{tr}(\boldsymbol{A}^{\text{T}}\boldsymbol{B}) = \text{tr}(\boldsymbol{B}^{\text{T}}\boldsymbol{A})$。由引理 5.2.1 立即得梯度矩阵

$$\frac{\partial|\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}|}{\partial\boldsymbol{X}} = 2|\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}}|(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}\boldsymbol{X} \tag{5.2.54}$$

式中，使用了矩阵转置与求逆可以交换顺序的性质，即

$$[(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}]^{\text{T}} = [(\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{\text{T}}]^{-1} = (\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\text{T}})^{-1}$$

类似地，令 $\boldsymbol{X} \in R^{m\times n}$。若 $\text{rank}(\boldsymbol{X}) = n$ 即 $\boldsymbol{X}^{\text{T}}\boldsymbol{X}$ 可逆，则有

$$\text{d}|\boldsymbol{X}^{\text{T}}\boldsymbol{X}| = \text{tr}\left(2|\boldsymbol{X}^{\text{T}}\boldsymbol{X}|(\boldsymbol{X}^{\text{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\text{T}}\text{d}\boldsymbol{X}\right) \tag{5.2.55}$$

由此得

$$\frac{\partial|\boldsymbol{X}^{\text{T}}\boldsymbol{X}|}{\partial\boldsymbol{X}} = 2|\boldsymbol{X}^{\text{T}}\boldsymbol{X}|\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\text{T}}\boldsymbol{X})^{-1} \tag{5.2.56}$$

再考虑矩阵乘积 $\boldsymbol{AXB}$ 的行列式，有

$$\begin{aligned}
\text{d}|\boldsymbol{AXB}| &= |\boldsymbol{AXB}|\text{tr}\left((\boldsymbol{AXB})^{-1}\text{d}(\boldsymbol{AXB})\right) \\
&= |\boldsymbol{AXB}|\text{tr}\left((\boldsymbol{AXB})^{-1}\boldsymbol{A}(\text{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{B}\right) \\
&= |\boldsymbol{AXB}|\text{tr}\left(\boldsymbol{B}(\boldsymbol{AXB})^{-1}\boldsymbol{A}\text{d}\boldsymbol{X}\right)
\end{aligned}$$

在得到最后一个式子时，使用了 $\text{tr}(\boldsymbol{CB}) = \text{tr}(\boldsymbol{BC})$。

这样一来，由引理 5.2.1 立即得

$$\frac{\partial|\boldsymbol{AXB}|}{\partial\boldsymbol{X}} = |\boldsymbol{AXB}|\boldsymbol{A}^{\text{T}}(\boldsymbol{B}^{\text{T}}\boldsymbol{X}^{\text{T}}\boldsymbol{A}^{\text{T}})^{-1}\boldsymbol{B}^{\text{T}} \tag{5.2.57}$$

令 $f(\boldsymbol{X}) = |\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}|$，则其微分为

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{d}|\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}| \\
&= |\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}|\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-1}\mathrm{d}(\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})\right) \\
&= |\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}|\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-1}\left[(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{AX}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{XA}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\right]\right) \\
&= |\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}|\left[\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{AX}^{\mathrm{T}}\right) + \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{XA}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\right)\right] \\
&= |\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}|\left[\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{AX}^{\mathrm{T}}\right) + \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})(\boldsymbol{XA})^{\mathrm{T}}\right)\right] \\
&= |\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}|\left[\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{AX}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right) + \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{XA})^{T}(\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)\right] \\
&= |\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}|\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)
\end{aligned}
$$

于是，引理 5.2.1 给出梯度

$$
\frac{\partial|\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}|}{\partial\boldsymbol{X}} = (\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}})^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{X}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{A}) \tag{5.2.58}
$$

式中，$\boldsymbol{D}^{-\mathrm{T}} = (\boldsymbol{D}^{-1})^{\mathrm{T}}$。

类似地，行列式 $|\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|$ 的微分为

$$
\begin{aligned}
\mathrm{d}|\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}| &= |\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}\mathrm{d}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})\right) \\
&= |\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}\left[(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX} + \boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right]\right) \\
&= |\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|\left[\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}\right) + \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)\right] \\
&= |\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|\left[\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}(\boldsymbol{AX})^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right) + \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)\right] \\
&= |\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{A})\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)
\end{aligned}
$$

于是，引理 5.2.1 给出梯度

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial|\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|}{\partial\boldsymbol{X}} &= |\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-\mathrm{T}} &(5.2.59)\\
&= 2|\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|\boldsymbol{AX}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}, \quad \boldsymbol{A}\ \text{为对称矩阵} &(5.2.60)
\end{aligned}
$$

表 5.2.2 汇总了一些典型的行列式函数的微分矩阵与梯度矩阵的对应关系。

表 5.2.2 几种行列式函数的微分矩阵与梯度矩阵的对应关系[296]

行列式 $f(\boldsymbol{X})$	微分矩阵 $\mathrm{d}f(\boldsymbol{X})$	梯度矩阵 $\partial f(\boldsymbol{X})/\partial\boldsymbol{X}$
$\lvert\boldsymbol{X}\rvert$	$\lvert\boldsymbol{X}\rvert\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$\lvert\boldsymbol{X}\rvert\boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}$
$\lvert\boldsymbol{X}^2\rvert$	$2\lvert\boldsymbol{X}\rvert^2\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$2\lvert\boldsymbol{X}\rvert^2\boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}$
$\lvert\boldsymbol{XX}^{\mathrm{T}}\rvert$	$2\lvert\boldsymbol{XX}^{\mathrm{T}}\rvert\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{XX}^{\mathrm{T}})^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$2\lvert\boldsymbol{XX}^{\mathrm{T}}\rvert(\boldsymbol{XX}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{X}$
$\lvert\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\rvert$	$2\lvert\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\rvert\mathrm{tr}((\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$2\lvert\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\rvert\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}$
$\lvert\boldsymbol{AXB}\rvert$	$\lvert\boldsymbol{AXB}\rvert\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}(\boldsymbol{AXB})^{-1}\boldsymbol{A}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$\lvert\boldsymbol{AXB}\rvert\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$
$\lvert\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}\rvert$	$\lvert\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}\rvert\mathrm{tr}((\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{A})\mathrm{d}\boldsymbol{X})$	$\lvert\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}\rvert(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})^{-\mathrm{T}}$

5.2.3 二阶微分矩阵与 Hessian 矩阵

一个实值函数对矩阵变元的连续二次微分得到的结果称为该函数的二阶微分矩阵。

令 $f(\boldsymbol{x})$ 是 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 的标量函数，则 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}$ 的 Hessian 矩阵是一个 $n\times n$ 矩阵，定义为

$$\boldsymbol{H}[f(\boldsymbol{x})] \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}\left(\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}}\right)^{\mathrm{T}} = \frac{\partial \nabla f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} \tag{5.2.61}$$

矩阵的实值函数 $f(\boldsymbol{X})$ 在 $\boldsymbol{X}$ 的 Hessian 矩阵定义为

$$\boldsymbol{H}[f(\boldsymbol{X})] \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial}{\partial(\mathrm{vec}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}}\left(\frac{\partial f(\boldsymbol{X})}{\partial(\mathrm{vec}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}}\right)^{\mathrm{T}} \tag{5.2.62}$$

根据这一定义求 Hessian 矩阵，显然比较复杂。更简单的方法是利用实函数 $f(\boldsymbol{X})$ 的二阶微分矩阵与 Hessian 矩阵之间的对应关系。

令 $x,\boldsymbol{x},\boldsymbol{X}$ 分别代表函数的标量、$n\times 1$ 向量和 $n\times q$ 矩阵，而 $f(\cdot),\boldsymbol{f}(\cdot),\boldsymbol{F}(\cdot)$ 则分别表示标量函数、$m\times 1$ 向量函数和 $m\times p$ 矩阵函数。

表 5.2.3 的二阶辨识表 (second identification table) 描述了不同函数的二阶微分矩阵与 Hessian 矩阵之间的基本对应关系。

表 5.2.3 二阶辨识表[296, p.190]

函数	二阶微分矩阵	Hessian 矩阵 $\boldsymbol{H}$	$\boldsymbol{H}$ 的维数
$f(x)$	$\mathrm{d}^2[f(x)]=\beta(\mathrm{d}x)^2$	$\boldsymbol{H}[f(x)]=\beta$	1×1
$f(\boldsymbol{x})$	$\mathrm{d}^2[f(\boldsymbol{x})]=(\mathrm{d}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\mathrm{d}\boldsymbol{x}$	$\boldsymbol{H}[f(\boldsymbol{x})]=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})$	$n\times n$
$f(\boldsymbol{X})$	$\mathrm{d}^2[f(\boldsymbol{F})]=(\mathrm{d}\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}))^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\mathrm{d}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}))$	$\boldsymbol{H}[f(\boldsymbol{X})]=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})$	$nq\times nq$
$\boldsymbol{f}(x)$	$\mathrm{d}^2[\boldsymbol{f}(x)]=\boldsymbol{b}(\mathrm{d}x)^2$	$\boldsymbol{H}[\boldsymbol{f}(x)]=\boldsymbol{b}$	$m\times 1$
$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$	$\mathrm{d}^2[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})]=(\boldsymbol{I}_m\otimes\mathrm{d}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\mathrm{d}\boldsymbol{x}$	$\boldsymbol{H}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})]=\frac{1}{2}[\boldsymbol{B}+(\boldsymbol{B}')_v]$	$mn\times n$
$\boldsymbol{f}(\boldsymbol{X})$	$\mathrm{d}^2[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{X})]=(\boldsymbol{I}_m\otimes\mathrm{d}\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}))^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\mathrm{d}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}))$	$\boldsymbol{H}[\boldsymbol{f}(\boldsymbol{X})]=\frac{1}{2}[\boldsymbol{B}+(\boldsymbol{B}')_v]$	$mnq\times nq$
$\boldsymbol{F}(x)$	$\mathrm{d}^2[\boldsymbol{F}(x)]=\boldsymbol{B}(\mathrm{d}x)^2$	$\boldsymbol{H}[\boldsymbol{F}(x)]=\mathrm{vec}(\boldsymbol{B})$	$mp\times 1$
$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})$	$\mathrm{d}^2[\mathrm{vec}(\boldsymbol{F})]=(\boldsymbol{I}_{mp}\otimes\mathrm{d}\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\mathrm{d}\boldsymbol{x}$	$\boldsymbol{H}[\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})]=\frac{1}{2}[\boldsymbol{B}+(\boldsymbol{B}')_v]$	$mnp\times n$
$\boldsymbol{F}(\boldsymbol{X})$	$\mathrm{d}^2[\mathrm{vec}(\boldsymbol{F})]=(\boldsymbol{I}_{mp}\otimes\mathrm{d}\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}))^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\mathrm{d}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}))$	$\boldsymbol{H}[\boldsymbol{F}(\boldsymbol{x})]=\frac{1}{2}[\boldsymbol{B}+(\boldsymbol{B}')_v]$	$mnpq\times nq$

表 5.2.3 中，在向量函数 $\boldsymbol{f}$ 的情况下，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 和 $(\boldsymbol{B}')_v$ 分别为

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_1\\ \boldsymbol{B}_2\\ \vdots\\ \boldsymbol{B}_m\end{bmatrix},\qquad (\boldsymbol{B}')_v=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{B}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{B}_m^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} \tag{5.2.63}$$

而在矩阵函数 $\boldsymbol{F}$ 的情况下，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 和 $(\boldsymbol{B}')_v$ 分别为

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{11}\\ \vdots\\ \boldsymbol{B}_{m1}\\ \vdots\\ \boldsymbol{B}_{1p}\\ \vdots\\ \boldsymbol{B}_{mp}\end{bmatrix},\qquad (\boldsymbol{B}')_v=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{11}^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{B}_{m1}^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{B}_{1p}^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{B}_{mp}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} \tag{5.2.64}$$

所有分块矩阵 $\boldsymbol{B}_1,\boldsymbol{B}_2,\cdots,\boldsymbol{B}_m$ 以及 $\boldsymbol{B}_{11},\cdots,\boldsymbol{B}_{mp}$ 都是 $n\times n$ 矩阵 (若 $\boldsymbol{f}$ 和 $\boldsymbol{F}$ 分别是 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 的向量函数和矩阵函数) 或者都是 $nq\times nq$ 矩阵 (若 $\boldsymbol{f}$ 和 $\boldsymbol{F}$ 分别是 $n\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的向量函数和矩阵函数)。

在许多情况下，矩阵的实值函数 $f(\boldsymbol{X})$ 取以下形式之一：

$$\mathrm{d}^2 f(\boldsymbol{X})=\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{B}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\right) \tag{5.2.65}$$

或

$$\mathrm{d}^2 f(\boldsymbol{X})=\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{B}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{C}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\right) \tag{5.2.66}$$

在这些情况下，标量函数 $f(\boldsymbol{X})$ 的 Hessian 矩阵可以很容易从二阶微分矩阵求出，详见下面的定理。

定理 5.2.7 [296] 令 $f(\boldsymbol{X})$ 是 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的实值函数，并可二次微分，则函数 $f(\boldsymbol{X})$ 在 $\boldsymbol{X}$ 的二阶微分矩阵与 Hessian 矩阵之间存在下面的对应关系：

$$\mathrm{d}^2 f(\boldsymbol{X})=\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{B}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)\Longleftrightarrow \boldsymbol{H}(f(\boldsymbol{X}))=\frac{1}{2}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{C}+\boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}) \tag{5.2.67}$$

和

$$\mathrm{d}^2 f(\boldsymbol{X})=\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{B}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{C}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)\Longleftrightarrow \boldsymbol{H}(f(\boldsymbol{X}))=\frac{1}{2}\boldsymbol{K}_{nm}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{C}+\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{B}) \tag{5.2.68}$$

式中，$\boldsymbol{K}_{nm}$ 为交换矩阵。

证明 回顾 1.10 节，多个矩阵乘积的迹与 Kronecker 积之间有下列关系：

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{ABCD})=(\mathrm{vec}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{C})\mathrm{vec}(\boldsymbol{D})$$

从而有

$$\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{B}(\mathrm{d}\,\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)=(\mathrm{d}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{X})))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{C})\mathrm{d}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}))$$

以及

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{B}(\mathrm{d}\,\boldsymbol{X})\boldsymbol{C}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)&=(\mathrm{d}\,\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}))^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{C})\mathrm{d}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}))\\&=(\mathrm{d}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})))^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}_{nm}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{C})\mathrm{d}(\mathrm{vec}(\boldsymbol{X}))\end{aligned}$$

由二阶辨识表，立即得到定理的结果。 ■

下面举几个例子说明如何应用定理 5.2.7 求实值函数的 Hessian 矩阵。

例 5.2.3 考虑实值函数

$$f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{-1}) \tag{5.2.69}$$

其中，$\boldsymbol{X}$ 是一个 $n \times n$ 矩阵。由于

$$\mathrm{d}f(\boldsymbol{X}) = -\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1}\right) \tag{5.2.70}$$

求上述一阶微分的微分，并利用 $\mathrm{d}(\mathrm{tr}\boldsymbol{U}) = \mathrm{tr}(\mathrm{d}\boldsymbol{U})$，得二阶微分矩阵

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}^2 f(\boldsymbol{X}) &= -\mathrm{tr}\left((\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1}\right) - \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})(\mathrm{d}\boldsymbol{X}^{-1})\right) \\
&= 2\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1}\right) \\
&= 2\mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^{-2}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})\boldsymbol{X}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right)
\end{aligned} \tag{5.2.71}$$

利用定理 5.2.7，即可得到 Hessian 矩阵

$$\boldsymbol{H}(f(\boldsymbol{X})) = \boldsymbol{K}_{nn}((\boldsymbol{X}^{-2})^{\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{X}^{-1} + \boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}} \otimes \boldsymbol{X}^{-2}) \tag{5.2.72}$$

例 5.2.4 对于二次型函数

$$f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}) \tag{5.2.73}$$

其一阶微分为

$$\mathrm{d}f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\mathrm{d}\boldsymbol{X}\right) \tag{5.2.74}$$

再次求微分，得二阶微分

$$\mathrm{d}^2 f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\mathrm{d}\boldsymbol{X})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\mathrm{d}\boldsymbol{X} \tag{5.2.75}$$

由定理 5.2.7 知 Hessian 矩阵为

$$\boldsymbol{H}(f(\boldsymbol{X})) = \boldsymbol{I} \otimes (\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}) \tag{5.2.76}$$

例 5.2.5 [311] 在快速子空间跟踪中，神经网络的学习算法由目标函数

$$J(\boldsymbol{W}) = \frac{1}{2}\left[\mathrm{tr}\left(\log(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{W})\right) - \mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W})\right] \tag{5.2.77}$$

的最大化确定，式中，$\boldsymbol{W}$ 是一个 $n \times r$ 矩阵；$\boldsymbol{R} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}_k \boldsymbol{x}_k^{\mathrm{T}}\} \in R^{n \times n}$ 为观测数据向量的自相关矩阵，它是 $n \times n$ 对称矩阵。求目标函数的一阶微分，得

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}J(\boldsymbol{W}) &= \frac{1}{2}\left[\mathrm{d}\left(\mathrm{tr}[\log(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{W})]\right) - \mathrm{d}\left(\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W})\right)\right] \\
&= \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right) - \mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{W})
\end{aligned} \tag{5.2.78}$$

由引理 5.2.1 立即得梯度矩阵

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{W})^{-1} - \boldsymbol{W} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{W})^{-1} - \boldsymbol{W} \tag{5.2.79}$$

令其等于零矩阵，即有

$$\boldsymbol{RW}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}=\boldsymbol{W}$$

两边左乘矩阵 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}$，则

$$\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}=\boldsymbol{I} \tag{5.2.80}$$

即学习算法可以保证，神经网络的突触权矩阵 $\boldsymbol{W}$ 收敛为半正交矩阵。

另一方面，由式 (5.2.78)，又可求出二阶微分

$$\begin{aligned}
\mathrm{d}^2J(\boldsymbol{W}) =& \mathrm{d}\left(\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right)\right)-\mathrm{d}\left(\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}\mathrm{d}\boldsymbol{W})\right)\\
=&\mathrm{tr}\left(\mathrm{d}\left((\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right)\right)-\mathrm{tr}(\mathrm{d}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{W})\\
=&\mathrm{tr}\left(\mathrm{d}\left((\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\right)\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}+(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\mathrm{d}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W})\right)-\\
&\mathrm{tr}(\mathrm{d}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{W})\\
=&-\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\mathrm{d}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right)+\\
&\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right)-\mathrm{tr}\left((\mathrm{d}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right)\\
=&-\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{RW}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right)-\\
&\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right)+\\
&\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}(\mathrm{d}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{R}\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right)-\mathrm{tr}\left((\mathrm{d}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})\mathrm{d}\boldsymbol{W}\right)
\end{aligned}$$

由定理 5.2.7 即得 Hessian 矩阵

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{H}(J(\boldsymbol{W}))=&-(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\otimes\left[\boldsymbol{RW}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\right]-\\
&\boldsymbol{K}_{kr}\left[\boldsymbol{RW}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\right]\otimes\left[(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\right]+\\
&(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{RW})^{-1}\boldsymbol{R}-\boldsymbol{I}
\end{aligned} \tag{5.2.81}$$

式中，$\boldsymbol{K}_{rn}$ 为 $rn\times rn$ 交换矩阵。

有了目标函数的梯度矩阵和 Hessian 矩阵，就可以对得到的自适应算法进行统计性能分析。对这一分析有兴趣的读者，可进一步参考文献 [311]。

5.3 共轭梯度与无约束最优化

在许多应用中，无约束最优化问题的目标函数是复向量或者复矩阵的二次型实值函数。在这些场合，最优化问题的求解必须计算目标函数相对于复向量或者复矩阵的梯度。很显然，这类梯度有两种形式：

(1) 梯度：目标函数相对于复向量或者复矩阵本身的梯度；

(2) 共轭梯度：目标函数相对于复共轭向量或者复共轭矩阵的梯度。

首先考查复变量 z 及其复数共轭 z^* 的实值函数 $f(z,z^*)$。求稳定点的条件 (式 (5.1.4) 中的第一式) 变成

$$\frac{\partial f(z,z^*)}{\partial z}=0 \quad 或 \quad \frac{\partial f(z,z^*)}{\partial z^*}=0 \tag{5.3.1}$$

这涉及到实值函数 $f(z,z^*)$ 关于复变量 z 或其复数共轭 z^* 的偏导数。

5.3.1 实值函数相对于复变量的偏导数

将复数

$$z=x+\mathrm{j}y,\quad z^*=x-\mathrm{j}y \tag{5.3.2}$$

或

$$x=\frac{1}{2}(z+z^*),\quad y=\frac{1}{2\mathrm{j}}(z-z^*) \tag{5.3.3}$$

看作变量替换，即可引进复数 z 和共轭复数 z^* 的形式导数分别为

$$\frac{\partial}{\partial z}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}-\mathrm{j}\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{5.3.4}$$

和

$$\frac{\partial}{\partial z^*}=\frac{1}{2}\left(\frac{\partial}{\partial x}+\mathrm{j}\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{5.3.5}$$

容易验证，这些定义满足以下两个性质：

$$\frac{\partial z}{\partial z}=\frac{\partial z^*}{\partial z^*}=1 \tag{5.3.6}$$

$$\frac{\partial z}{\partial z^*}=\frac{\partial z^*}{\partial z}=0 \tag{5.3.7}$$

式 (5.3.6) 和式 (5.3.7) 描述了复变量理论的一个基本结果：在求偏导数时，复变量 z 和其复数共轭 z^* 可以当作两个独立的变量处理，即任何一个相对于另一个都可认为是常数。于是，复变量 z 的实值函数 $f(z,z^*)=|z|^2=zz^*$ 的一阶偏导数为 $\frac{\partial |z|^2}{\partial z}=z^*$ 和 $\frac{\partial |z|^2}{\partial z^*}=z$。

如果 $f(z,z^*)$ 关于实部变量 x 和虚部变量 y 的偏导数连续，则有

$$\frac{\partial f(z,z^*)}{\partial z}=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial f(z,z^*)}{\partial x}-\mathrm{j}\frac{\partial f(z,z^*)}{\partial y}\right] \tag{5.3.8}$$

和

$$\frac{\partial f(z,z^*)}{\partial z^*}=\frac{1}{2}\left[\frac{\partial f(z,z^*)}{\partial x}+\mathrm{j}\frac{\partial f(z,z^*)}{\partial y}\right] \tag{5.3.9}$$

下面的定理给出了求复变量的一般函数的稳定点的方法。

定理 5.3.1 [57] 若目标函数 $f(z,z^*)$ 是复变量 z 和 z^* 的实值函数，并且相对于 z 和 z^* 是解析的，则目标函数的所有稳定点可以通过令 $\frac{\partial f(z,z^*)}{\partial z}=0$ 或者 $\frac{\partial f(z,z^*)}{\partial z^*}=0$ 求出。

根据上述定理，为了求目标函数 $f(z,z^*)=|z|^2$ 的极小值，可以先计算偏导数 $\frac{\partial |z|^2}{\partial z}$ 或 $\frac{\partial |z|^2}{\partial z^*}$，并令偏导数等于零，求出稳定点。最方便的选择是令 $\frac{\partial |z|^2}{\partial z^*}=0$，直接得到稳定

点 $z=0$。由于函数 $f(z,z^*)=|z|^2$ 是严格凸的，故目标函数 $f(z,z^*)=|z|^2$ 的这个唯一稳定点就是该函数的全局极小点。

5.3.2 标量函数相对于复向量的梯度

在许多工程应用中，最小化问题的目标函数 $f(\boldsymbol{w})$ 往往是复向量 $\boldsymbol{w}$ 的标量函数形式。此时，最小化问题的解由

$$\boldsymbol{w}=\arg\ \min_{\boldsymbol{w}} f(\boldsymbol{w}) \tag{5.3.10}$$

给出，即最优解向量是目标函数 $f(\boldsymbol{w})$ 取全局极小值时的变元 $\boldsymbol{w}$。此时，需要求目标函数相对于复向量 $\boldsymbol{w}$ 的梯度。

在寻找优化问题的最优解过程中，往往需要对候补的解向量进行更新，使之收敛，而更新方向由目标函数相对于向量 (变元) 的梯度决定。相对于向量 $\boldsymbol{w}$ 的梯度算子记作 $\nabla_{\boldsymbol{w}}$，定义为

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}}=\nabla_{\boldsymbol{w}}\overset{\text{def}}{=}\left[\frac{\partial}{\partial w_1},\frac{\partial}{\partial w_2},\cdots,\frac{\partial}{\partial w_n}\right]^{\mathrm{T}} \tag{5.3.11}$$

因此，目标函数 $f(\boldsymbol{w})$ 相对于复向量 $\boldsymbol{w}$ 的梯度定义为

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}}=\nabla_{\boldsymbol{w}}f(\boldsymbol{w})\overset{\text{def}}{=}\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial w_1},\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial w_2},\cdots,\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial w_n}\right]^{\mathrm{T}} \tag{5.3.12}$$

而目标函数 $f(\boldsymbol{w})$ 相对于复数共轭向量 $\boldsymbol{w}$ 的梯度常简称为共轭梯度 (向量)，定义为

$$\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*}=\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})\overset{\text{def}}{=}\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial w_1^*},\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial w_2^*},\cdots,\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial w_n^*}\right]^{\mathrm{T}} \tag{5.3.13}$$

下面讨论行向量函数的梯度。

若 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{w})=[f_1(\boldsymbol{w}),f_2(\boldsymbol{w}),\cdots,f_m(\boldsymbol{w})]$ 为一 $1\times n$ 复行向量函数，则 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{w})$ 相对于复列向量 $\boldsymbol{w}$ 的梯度为一 $n\times m$ 矩阵，并定义为

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{w})}{\partial w_1} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{w})}{\partial w_1} & \cdots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{w})}{\partial w_1}\\ \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{w})}{\partial w_2} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{w})}{\partial w_2} & \cdots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{w})}{\partial w_2}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{w})}{\partial w_n} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{w})}{\partial w_n} & \cdots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{w})}{\partial w_n}\end{bmatrix} \tag{5.3.14}$$

类似地，行向量函数 $\boldsymbol{f}(\boldsymbol{w})$ 相对于复共轭列向量 $\boldsymbol{w}^*$ 的梯度称为共轭梯度矩阵，定义为

$$\frac{\partial \boldsymbol{f}(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*}=\begin{bmatrix}\dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{w})}{\partial w_1^*} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{w})}{\partial w_1^*} & \cdots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{w})}{\partial w_1^*}\\ \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{w})}{\partial w_2^*} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{w})}{\partial w_2^*} & \cdots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{w})}{\partial w_2^*}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \dfrac{\partial f_1(\boldsymbol{w})}{\partial w_n^*} & \dfrac{\partial f_2(\boldsymbol{w})}{\partial w_n^*} & \cdots & \dfrac{\partial f_m(\boldsymbol{w})}{\partial w_n^*}\end{bmatrix} \tag{5.3.15}$$，

特别地，容易求出

$$\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{w}}=\left[\frac{\partial w_1}{\partial \boldsymbol{w}},\frac{\partial w_2}{\partial \boldsymbol{w}},\cdots,\frac{\partial w_n}{\partial \boldsymbol{w}}\right]=\begin{bmatrix}\frac{\partial w_1}{\partial w_1} & \frac{\partial w_2}{\partial w_1} & \cdots & \frac{\partial w_n}{\partial w_1}\\ \frac{\partial w_1}{\partial w_2} & \frac{\partial w_2}{\partial w_2} & \cdots & \frac{\partial w_n}{\partial w_2}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \frac{\partial w_1}{\partial w_n} & \frac{\partial w_2}{\partial w_n} & \cdots & \frac{\partial w_n}{\partial w_n}\end{bmatrix}=\boldsymbol{I}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}}{\partial \boldsymbol{w}^*}=\left[\frac{\partial w_1^*}{\partial \boldsymbol{w}^*},\frac{\partial w_2^*}{\partial \boldsymbol{w}^*},\cdots,\frac{\partial w_n^*}{\partial \boldsymbol{w}^*}\right]=\begin{bmatrix}\frac{\partial w_1^*}{\partial w_1^*} & \frac{\partial w_2^*}{\partial w_1^*} & \cdots & \frac{\partial w_n^*}{\partial w_1^*}\\ \frac{\partial w_1^*}{\partial w_2^*} & \frac{\partial w_2^*}{\partial w_2^*} & \cdots & \frac{\partial w_n^*}{\partial w_2^*}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \frac{\partial w_1^*}{\partial w_n^*} & \frac{\partial w_2^*}{\partial w_n^*} & \cdots & \frac{\partial w_n^*}{\partial w_n^*}\end{bmatrix}=\boldsymbol{I}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{w}^*}=\left[\frac{\partial w_1}{\partial \boldsymbol{w}^*},\frac{\partial w_2}{\partial \boldsymbol{w}^*},\cdots,\frac{\partial w_n}{\partial \boldsymbol{w}^*}\right]=\begin{bmatrix}\frac{\partial w_1}{\partial w_1^*} & \frac{\partial w_2}{\partial w_1^*} & \cdots & \frac{\partial w_n}{\partial w_1^*}\\ \frac{\partial w_1}{\partial w_2^*} & \frac{\partial w_2}{\partial w_2^*} & \cdots & \frac{\partial w_n}{\partial w_2^*}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \frac{\partial w_n}{\partial w_1^*} & \frac{\partial w_n}{\partial w_2^*} & \cdots & \frac{\partial w_n}{\partial w_n^*}\end{bmatrix}=\boldsymbol{O}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}}{\partial \boldsymbol{w}}=\left[\frac{\partial w_1^*}{\partial \boldsymbol{w}},\frac{\partial w_2^*}{\partial \boldsymbol{w}},\cdots,\frac{\partial w_n^*}{\partial \boldsymbol{w}}\right]=\begin{bmatrix}\frac{\partial w_1^*}{\partial w_1} & \frac{\partial w_2^*}{\partial w_1} & \cdots & \frac{\partial w_n^*}{\partial w_1}\\ \frac{\partial w_1^*}{\partial w_2} & \frac{\partial w_2^*}{\partial w_2} & \cdots & \frac{\partial w_n^*}{\partial w_2}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \frac{\partial w_1^*}{\partial w_n} & \frac{\partial w_2^*}{\partial w_n} & \cdots & \frac{\partial w_n^*}{\partial w_n}\end{bmatrix}=\boldsymbol{O}$$

即有

$$\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{w}}=\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}}{\partial \boldsymbol{w}^*}=\boldsymbol{I} \tag{5.3.16}$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{w}^*}=\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}}{\partial \boldsymbol{w}}=\boldsymbol{O} \tag{5.3.17}$$

式中，$\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{O}$ 分别为单位矩阵和零矩阵。

式 (5.3.16) 和式 (5.3.17) 可以分别看作是复变量关系式 (5.3.6) 和式 (5.3.7) 在向量情况下的推广：任何一个复向量 $\boldsymbol{w}$ 和它的共轭向量 $\boldsymbol{w}^*$ 都可以当作两个独立的复变元处理，即在求梯度的过程中，复向量 $\boldsymbol{w}$ 相对于其共轭向量 $\boldsymbol{w}^*$ 可视为一常数；反之，$\boldsymbol{w}^*$ 相对于 $\boldsymbol{w}$ 也可视为一常数。

下面举三个例子说明如何求标量函数相对于复向量的梯度。

例 5.3.1 令 $f_1(\boldsymbol{w})=\boldsymbol{p}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{w}$ 为一标量函数，其中，$\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{w}$ 均为 $n\times 1$ 复向量。于

是，f_1 相对于 $\boldsymbol{w}^*$ 和 $\boldsymbol{w}$ 的梯度分别为

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{p}^{\rm H}\boldsymbol{w}) = \frac{\partial \boldsymbol{w}^{\rm T}}{\partial \boldsymbol{w}^*}\boldsymbol{p}^* = \boldsymbol{O}\boldsymbol{p}^* = \boldsymbol{0}$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}}(\boldsymbol{p}^{\rm H}\boldsymbol{w}) = \frac{\partial \boldsymbol{w}^{\rm T}}{\partial \boldsymbol{w}}\boldsymbol{p}^* = \boldsymbol{I}\boldsymbol{p}^* = \boldsymbol{p}^*$$

例 5.3.2 若 $\boldsymbol{p}$ 和 $\boldsymbol{w}$ 同为 $n\times 1$ 复向量，并且 $f_2(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w}^{\rm H}\boldsymbol{p}$ 为一标量函数，则

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^*}(\boldsymbol{w}^{\rm H}\boldsymbol{p}) = \frac{\partial \boldsymbol{w}^{\rm H}}{\partial \boldsymbol{w}^*}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{I}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{p}$$

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}}(\boldsymbol{w}^{\rm H}\boldsymbol{p}) = \frac{\partial \boldsymbol{w}^{\rm H}}{\partial \boldsymbol{w}}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{O}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{0}$$

例 5.3.3 考查 $n\times 1$ 复向量 $\boldsymbol{w}$ 的实值函数 $f(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$，其中，$\boldsymbol{A}$ 是一 $n\times n$ 实矩阵。由于

$$f(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_{ij}w_i w_j^*$$

故梯度的第 k 个分量为

$$\left[\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}}{\partial \boldsymbol{w}}\right]_k = \frac{\partial}{\partial w_k}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_{ij}w_i^* w_j = \sum_{i=1}^{n} A_{ik}w_i^*$$

而共轭梯度的第 k 个分量为

$$\left[\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}}{\partial \boldsymbol{w}^*}\right]_k = \frac{\partial}{\partial w_k^*}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} A_{ij}w_i^* w_j = \sum_{j=1}^{n} A_{kj}w_j$$

式中，利用了复数 w_i 和共轭复数 w_i^* 是相互独立的两个常数这一重要结果。因此，梯度和共轭梯度分别为

$$\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}}{\partial \boldsymbol{w}} = \boldsymbol{A}^{\rm T}\boldsymbol{w}^*$$

$$\frac{\partial \boldsymbol{w}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}}{\partial \boldsymbol{w}^*} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$$

从上述三个例子可见，对于变元为复向量的函数，存在目标函数相对于复向量的梯度 $\nabla_{\boldsymbol{w}}f(\boldsymbol{w})$ 和共轭梯度 $\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})$ 两种选择。那么，在设计最优化问题的学习算法时，应该选用哪一种梯度呢？为此，需要引出曲率方向的定义。

定义 5.3.1[157] 给定一个 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{H}$，称向量 $\boldsymbol{p}$ 为 (相对于矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的) 正曲率方向 (direction of positive curvature)，若二次型 $\boldsymbol{p}^{\rm H}\boldsymbol{H}\boldsymbol{p} > 0$；零曲率方向 (direction of zero curvature)，若 $\boldsymbol{p}^{\rm H}\boldsymbol{H}\boldsymbol{p} = 0$；负曲率方向 (direction of negative curvature)，若 $\boldsymbol{p}^{\rm H}\boldsymbol{H}\boldsymbol{p} < 0$。当矩阵 $\boldsymbol{H}$ 是非线性函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的 Hessian 矩阵时，称满足 $\boldsymbol{p}^{\rm H}\boldsymbol{H}\boldsymbol{p} > 0$ 的向量 $\boldsymbol{p}$ 为函数 f 的正曲率方向，满足 $\boldsymbol{p}^{\rm H}\boldsymbol{H}\boldsymbol{p} < 0$ 的向量 $\boldsymbol{p}$ 为函数 f 的负曲率方向。标量 $\boldsymbol{p}^{\rm H}\boldsymbol{H}\boldsymbol{p}$ 则称为函数 f 沿着方向 $\boldsymbol{p}$ 的曲率 (curvature)。

曲率方向也就是函数的最大变化率方向。

定理 5.3.2 [57] 令 $f(\boldsymbol{w})$ 是复向量 $\boldsymbol{w}$ 的实值函数。通过将 $\boldsymbol{w}$ 和 $\boldsymbol{w}^*$ 视为独立的变元，实目标函数 $f(\boldsymbol{w})$ 的曲率方向由共轭梯度向量 $\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})$ 给出。

证明 考虑实值函数 f 的变分

$$\begin{aligned}\delta f &= \sum_{i=1}^{n}\left(\frac{\partial f}{\partial w_i}\delta w_i + \frac{\partial f}{\partial w_i^*}\delta w_i^*\right)\\ &= [\nabla_{\boldsymbol{w}}f(\boldsymbol{w})]^{\mathrm{T}}\delta\boldsymbol{w} + [\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})]^{\mathrm{T}}\delta\boldsymbol{w}^*\end{aligned}$$

式中，$\delta\boldsymbol{w} = [\delta w_1, \delta w_2, \cdots, \delta w_n]^{\mathrm{T}}$ 是复向量 $\boldsymbol{w}$ 的变分。计算得 $\delta f = 2\mathrm{Re}\left\{[\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})]^{\mathrm{H}}\delta\boldsymbol{w}\right\}$。由 Cauchy-Schwarz 不等式知，这个变分满足不等式

$$|\delta f|^2 = 4\left|\mathrm{Re}\left\{[\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})]^{\mathrm{H}}\delta\boldsymbol{w}\right\}\right|^2 \leqslant 4\|\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})\|^2\|\delta\boldsymbol{w}\|^2$$

当且仅当 $\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w}) = c\delta\boldsymbol{w}$ (c 为非零的复常数) 时，等号成立。这表明，变分 δf 取最大值的条件是变分 $\delta\boldsymbol{w}$ 与共轭梯度 $\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})$ 二者的方向相同。因此，与实值函数 $f(\boldsymbol{w})$ 的最大变化率相对应的方向就是该函数相对于复共轭向量 $\boldsymbol{w}^*$ 的梯度 $\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})$ 的方向。 ■

定理 5.3.2 表明，在无约束的最优化问题中使用最陡下降法时，通常使用共轭梯度向量 $\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})$。由于梯度向量指出了目标函数最大变化率的方向，最优化问题的解向量可以使用“最陡下降法”迭代计算，即有

$$\boldsymbol{w}_k = \boldsymbol{w}_{k-1} - \mu\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w}), \quad \mu > 0 \tag{5.3.18}$$

就是说，候补解在迭代过程中的校正量与目标函数的负梯度成正比。上式称为优化问题候补解的学习算法；常数 μ 称为学习步长，它决定候补解趋向最优解的收敛速率。

下面是关于收敛速率的定义 [157]。

定义 5.3.2 令 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 是一收敛为真值向量 $\boldsymbol{x}_*$ 的向量序列，并且 $\boldsymbol{x}_k \neq \boldsymbol{x}_*$。若

$$\lim_{k\to\infty}\frac{\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_*\|_2}{\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_*\|_2^2} = \gamma_2, \qquad 0 < \gamma_2 < \infty$$

则 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 以 Q 二次速率 (Q-quadratically) 收敛为 $\boldsymbol{x}_*$。一个向量序列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 以 Q 超线性速率 (Q-superlinearlly) 收敛为 $\boldsymbol{x}_*$，若存在一个收敛为零的序列 $\{\beta_k\}$，使得对所有足够大的整数 k，恒有

$$\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_*\|_2 = \beta_k\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_*\|$$

根据定义，一个 Q 超线性收敛的向量序列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 满足 $\|\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{x}_*\| = o(\|\boldsymbol{x}_k - \boldsymbol{x}_*\|)$。

如果目标函数是“足够平滑的”(没有太多的极大值和极小值)，则最陡下降法将给出全局极小值。严格凸的函数必定是足够平滑的，可以保证最陡下降法正常工作。

下面列出了标量函数的共轭梯度公式。

(1) 若 $f(\boldsymbol{x}) = c$ 为常数，则共轭梯度 $\dfrac{\partial c}{\partial\boldsymbol{x}^*} = \boldsymbol{0}$。

(2) 线性法则：若 $f(\boldsymbol{x})$ 和 $g(\boldsymbol{x})$ 分别是向量 $\boldsymbol{x}$ 的实值函数，c_1 和 c_2 为复常数，则

$$\boxed{\frac{\partial[c_1f(\boldsymbol{x}) + c_2g(\boldsymbol{x})]}{\partial\boldsymbol{x}^*} = c_1\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}^*} + c_2\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial\boldsymbol{x}^*}} \tag{5.3.19}$$

(3) 乘积法则：

① 若 $f(\boldsymbol{x})$ 和 $g(\boldsymbol{x})$ 都是向量 $\boldsymbol{x}$ 的实值函数，则

$$\boxed{\frac{\partial f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*} = g(\boldsymbol{x})\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*} + f(\boldsymbol{x})\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*}} \tag{5.3.20}$$

② 若 $f(\boldsymbol{x}), g(\boldsymbol{x})$ 和 $h(\boldsymbol{x})$ 都是向量 $\boldsymbol{x}$ 的实值函数，则

$$\boxed{\begin{gathered}\frac{\partial f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x})h(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*} = g(\boldsymbol{x})h(\boldsymbol{x})\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*} + f(\boldsymbol{x})h(\boldsymbol{x})\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*} + \\ f(\boldsymbol{x})g(\boldsymbol{x})\frac{\partial h(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*}\end{gathered}} \tag{5.3.21}$$

(4) 商法则：若 $g(\boldsymbol{x}) \neq 0$，则

$$\boxed{\frac{\partial f(\boldsymbol{x})/g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \frac{1}{g^2(\boldsymbol{x})}\left[g(\boldsymbol{x})\frac{\partial f(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*} - f(\boldsymbol{x})\frac{\partial g(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*}\right]} \tag{5.3.22}$$

(5) 链式法则：若 $\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})$ 是 $\boldsymbol{x}$ 的复向量值函数，则

$$\boxed{\frac{\partial f(\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x}))}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \frac{\partial\,[\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}^*}\frac{\partial f(\boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{y}}} \tag{5.3.23}$$

式中，$\dfrac{\partial[\boldsymbol{y}(\boldsymbol{x})]^{\mathrm{T}}}{\partial \boldsymbol{x}^*}$ 为 $n \times n$ 矩阵。

(6) 若 $n \times 1$ 向量为 $\boldsymbol{a}$ 与 $\boldsymbol{x}$ 无关的常数向量，则

$$\boxed{\frac{\partial \boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \boldsymbol{0}, \qquad \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \boldsymbol{a}} \tag{5.3.24}$$

(7) 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个与向量 $\boldsymbol{x}$ 无关的矩阵，则

$$\boxed{\begin{aligned}\frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}} &= \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}^*, & \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}^*} &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \\ \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{A}} &= \boldsymbol{x}^*\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}, & \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{A}} &= \boldsymbol{x}^*\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\end{aligned}} \tag{5.3.25}$$

例 5.3.4 考查求解超定矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{b}$ 的最小二乘方法。定义误差平方和

$$\begin{aligned}J(\boldsymbol{w}) &= \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{b}\|_2^2 = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{b})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{b}) \\ &= \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} + \boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}\end{aligned}$$

为准则函数。由于矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{b}$ 的平衡点满足

$$\nabla_{\boldsymbol{w}^*} J(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$$

若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 非奇异，则平衡点为

$$\boldsymbol{w} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$$

它就是我们熟悉的最小二乘解。

例 5.3.5 考查求解超定矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}=\boldsymbol{b}$ 的最大似然方法。定义对数似然函数

$$l(\hat{\boldsymbol{w}})=C-\frac{1}{\sigma^2}\boldsymbol{e}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e} \tag{5.3.26}$$

式中，C 为一常数；$\boldsymbol{e}$ 为误差向量，定义为

$$\boldsymbol{e}=\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{w}} \tag{5.3.27}$$

将式 (5.3.27) 代入式 (5.3.26) 得

$$l(\hat{\boldsymbol{w}})=C-\frac{1}{\sigma^2}\boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}+\frac{1}{\sigma^2}\boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{w}}+\frac{1}{\sigma^2}\hat{\boldsymbol{w}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}-\frac{1}{\sigma^2}\hat{\boldsymbol{w}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{w}} \tag{5.3.28}$$

求对数似然函数相对于 $\boldsymbol{w}$ 的共轭梯度，则

$$\nabla_{\hat{\boldsymbol{w}}^*}l(\hat{\boldsymbol{w}})=\frac{1}{\sigma^2}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}-\frac{1}{\sigma^2}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\hat{\boldsymbol{w}}$$

令其等于零，得

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}=\boldsymbol{0}\quad 或\quad \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$$

式中，$\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}$ 是使对数似然函数 $l(\hat{\boldsymbol{w}})$ 最大化的 $\hat{\boldsymbol{w}}$ 值。于是，若 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 非奇异，则

$$\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} \tag{5.3.29}$$

这就是矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}=\boldsymbol{b}$ 的最大似然解。可见，矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}=\boldsymbol{b}$ 的最大似然解与最小二乘解等价。

5.3.3 迹函数的共轭梯度

迹函数对复共轭向量 $\boldsymbol{x}^*$ 或者复共轭矩阵 $\boldsymbol{A}^*$ 求梯度时，通常都先求出迹函数相对于元素 x_i^* 或者 A_{ij}^* 的偏导 (标量)。然后，再把偏导写成向量或者矩阵形式，得到迹函数的共轭向量或者共轭矩阵。在求偏导的过程中，需要记住的是，一个复变量和它的复共轭是两个独立的变量。

令 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 分别是 $n\times 1$ 复向量和 $n\times n$ 复矩阵。易知

$$[\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}]_j=\sum_{k=1}^{n}x_k^*a_{kj}\quad\Rightarrow\quad[\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}]_{ij}=\sum_{k=1}^{n}x_ix_k^*A_{kj}$$

和

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})=\sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}x_k^*a_{ki}x_i=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

类似地，有

$$[\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}]_i=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}x_k\quad\Rightarrow\quad[\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}]_{ij}=\sum_{k=1}^{n}a_{ik}x_kx_j^*$$

和

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{ik}x_k x_i^* = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

可见

$$f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \mathrm{tr}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}) \tag{5.3.30}$$

由 $\dfrac{\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，立即有

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \tag{5.3.31}$$

下面再举几个例子说明如何求迹的共轭梯度。

例 5.3.6 对于 $n \times n$ 复矩阵 $\boldsymbol{A}$，由于 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii}^*$，故共轭梯度 $\dfrac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{A}^*}$ 的 (i,j) 元素为

$$\left[\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{A}^*}\right]_{ij} = \frac{\partial}{\partial a_{ij}^*}\sum_{k=1}^{n} a_{kk}^* = \begin{cases}1, & j = i\\ 0, & j \neq 0\end{cases}$$

即有

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{I} \tag{5.3.32}$$

另有

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{O} \tag{5.3.33}$$

例 5.3.7 考查目标函数 $f(\boldsymbol{A}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})$，其中，$\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 $m \times n$ 复矩阵。首先，矩阵乘积的元素为

$$[\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}]_{ij} = \sum_{l=1}^{n} a_{li}^* b_{lj}$$

故矩阵乘积的迹

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}) = \sum_{p=1}^{m}\sum_{l=1}^{n} a_{lp}^* b_{lp}$$

于是，梯度 $\dfrac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})}{\partial \boldsymbol{A}^*}$ 是一 $m \times n$ 矩阵，其元素

$$\left[\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{A}^*}\right]_{ij} = \frac{\partial}{\partial a_{ij}^*}\left(\sum_{p=1}^{m}\sum_{l=1}^{n} a_{lp}^* b_{lp}\right) = b_{ij}$$

即有

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{B}$$

又由于 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})$，故

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{B}$$

例 5.3.8 由于 $\text{tr}(\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\text{H}}) = \text{tr}(\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{y}) = \boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{y}$，易知

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\text{H}})}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \frac{\partial \boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{y}}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \boldsymbol{y}$$

例 5.3.9 令 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{W} \in C^{n\times n}$，则矩阵乘积 $\boldsymbol{WA}$ 的 (p,j) 元素为

$$[\boldsymbol{WA}]_{pj} = \sum_{k=1}^{n} w_{pk}a_{kj}$$

于是，$\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{WA}$ 的 (i,j) 元素由

$$[\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{WA}]_{ij} = \sum_{p=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{pi}^* w_{pk}a_{kj}$$

定义，其对角元素之和给出矩阵 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{WA}$ 的迹，即

$$\text{tr}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{WA}) = \sum_{l=1}^{n}\sum_{p=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{pl}^* w_{pk}a_{kl}$$

求此迹函数关于矩阵元素 a_{ij}^* 的偏导，得

$$\begin{aligned}\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{WA})}{\partial a_{ij}} &= \frac{\partial}{\partial a_{ij}^*}\left(\sum_{l=1}^{n}\sum_{p=1}^{n}\sum_{k=1}^{n} a_{pl}^* w_{pk}a_{kl}\right)\\ &= \sum_{k=1}^{n} w_{ik}a_{kj} = [\boldsymbol{WA}]_{ij}\end{aligned}$$

写成矩阵形式，为

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{WA})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{WA} \tag{5.3.34}$$

类似地，有

$$\begin{aligned}&[\boldsymbol{AW}]_{ip} = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}w_{kp}\\ \Rightarrow &[\boldsymbol{AWA}^{\text{H}}]_{ij} = \sum_{k=1}^{n}\sum_{p=1}^{n} a_{ik}w_{kp}a_{jp}^*\\ \Rightarrow &\text{tr}(\boldsymbol{AWA}^{\text{H}}) = \sum_{i=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{p=1}^{n} a_{ik}w_{kp}a_{ip}^*\\ \Rightarrow &\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{AWA}^{\text{H}})}{\partial a_{ij}^*} = \frac{\partial}{\partial a_{ij}^*}\left(\sum_{l=1}^{n}\sum_{k=1}^{n}\sum_{p=1}^{n} a_{lk}w_{kp}a_{lp}^*\right) = [\boldsymbol{AW}]_{ij}\end{aligned}$$

即有

$$\frac{\partial \text{tr}(\boldsymbol{AWA}^{\text{H}})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{AW} \tag{5.3.35}$$

将以上结果汇总，便可以得到迹函数的共轭梯度的几个常用公式如下：

$$
\boxed{\begin{aligned}
&\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{y}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y})}{\partial \boldsymbol{x}^*} = \boldsymbol{y}\\
&\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{B}\\
&\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{I}, \quad \frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{O}\\
&\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{A})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{A}, \quad \frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})}{\partial \boldsymbol{A}^*} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{W}
\end{aligned}} \tag{5.3.36}
$$

例 5.3.10 [523] 考虑例 5.1.7 的 CDMA 系统中，仍然共有 K 个用户在通信，但每个用户的扩频波形向量变成复向量 $\boldsymbol{s}_k(t)$，接收信号向量 $\boldsymbol{y}$ 也为复向量。此时，设计多用户检测器 $\boldsymbol{M}$ 的目标函数变为

$$
\begin{aligned}
J(\boldsymbol{M}) &= \mathrm{E}\{\|\boldsymbol{b} - \boldsymbol{M}\boldsymbol{y}\|_2^2\}\\
&= \mathrm{tr}\left(\mathrm{cov}(\boldsymbol{b} - \boldsymbol{M}\boldsymbol{y})\right)\\
&= \mathrm{tr}(\boldsymbol{I}) + \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{M}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{R} + \sigma^2\boldsymbol{R})\boldsymbol{M}^{\mathrm{H}}\right) -\\
&\quad\ \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}\boldsymbol{M}^{\mathrm{H}}) - \mathrm{tr}(\boldsymbol{M}\boldsymbol{R}\boldsymbol{A})
\end{aligned}
$$

利用式 (5.3.36)，易求出

$$
\frac{\partial J(\boldsymbol{M})}{\partial \boldsymbol{M}^*} = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{R} + \sigma^2\boldsymbol{R}) - \boldsymbol{A}\boldsymbol{R}
$$

令其等于零，并假定 $\boldsymbol{R}$ 非奇异，立即有

$$
\boldsymbol{M} = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{R}\boldsymbol{A}^2 + \sigma^2\boldsymbol{I})^{-1}
$$

与例 5.1.7 的检测器具有相同的形式，不同的是这里的检测器为复矩阵。

5.3.4 Hessian 矩阵 (共轭梯度的梯度)

对于以复向量为变元的目标函数 $f(\boldsymbol{w})$ 而言，其二阶偏导的向量有四种不同的定义方式：

(1) 梯度的梯度 $\nabla_{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}[\nabla_{\boldsymbol{w}} f(\boldsymbol{w})] = \dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}\left[\dfrac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}}\right]$；

(2) 共轭梯度的梯度 $\nabla_{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}[\nabla_{\boldsymbol{w}^*} f(\boldsymbol{w})] = \dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}\left[\dfrac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*}\right]$；

(3) 梯度的共轭梯度 $\nabla_{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}}[\nabla_{\boldsymbol{w}} f(\boldsymbol{w})] = \dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}}\left[\dfrac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}}\right]$；

(4) 共轭梯度的共轭梯度 $\nabla_{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}}[\nabla_{\boldsymbol{w}^*} f(\boldsymbol{w})] = \dfrac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}}\left[\dfrac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*}\right]$。

根据定理 5.3.2，以复向量作变元的实目标函数 $f(\boldsymbol{w})$，它的最大变化率的方向由共轭梯度向量 $\nabla_{\boldsymbol{w}^*} f(\boldsymbol{w})$ 给出，这使得在优化问题中，主要使用共轭梯度的梯度，而很少使用其他三种二阶梯度。

共轭梯度的梯度为矩阵形式，常称为目标函数的 Hessian 矩阵。因此，在以复向量作变元的情况下，实值函数的 Hessian 矩阵乃指该函数的共轭梯度的梯度，而非梯度的梯度。为简便计，以后使用符号

$$\nabla_{\boldsymbol{w}}^2 f(\boldsymbol{w}) = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}\left[\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*}\right] \tag{5.3.37}$$

表示目标函数 $f(\boldsymbol{w})$ 的 Hessian 矩阵。

根据定义，Hessian 矩阵可具体写作

$$\nabla_{\boldsymbol{w}}^2 f(\boldsymbol{w}) \overset{\mathrm{def}}{=} \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^* \partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}} = \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}\begin{bmatrix} \frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial w_1^*} \\ \frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial w_2^*} \\ \vdots \\ \frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial w_n^*} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_1^* \partial w_1} & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_1^* \partial w_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_1^* \partial w_n} \\ \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_2^* \partial w_1} & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_2^* \partial w_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_2^* \partial w_n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_n^* \partial w_1} & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_n^* \partial w_2} & \cdots & \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_n^* \partial w_n} \end{bmatrix} \tag{5.3.38}$$

换言之，$\nabla_{\boldsymbol{w}}^2 f(\boldsymbol{w})$ 的元素为

$$\left[\nabla_{\boldsymbol{w}}^2 f(\boldsymbol{w})\right]_{i,j} = \frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial w_i^* \partial w_j} \tag{5.3.39}$$

作为必要条件式 (5.1.72) 和充分条件式 (5.1.74) 在复向量情况下的推广，判断实目标函数 $f(\boldsymbol{w})$ 的局部极小点的条件如下：

(1) 必要条件：若 $\boldsymbol{w}_0$ 是 $f(\boldsymbol{w})$ 的局部极小点，则该函数在点 $\boldsymbol{w}_0$ 的共轭梯度为零向量，并且共轭梯度的梯度即 Hessian 矩阵半正定，即

$$\left.\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*}\right|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0} = \boldsymbol{0}, \qquad \left.\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^* \partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}\right|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0} \geqslant 0 \tag{5.3.40}$$

(2) 充分条件：若函数 $f(\boldsymbol{w})$ 在 $\boldsymbol{w}_0$ 的共轭梯度为零向量，并且 Hessian 矩阵正定，即

$$\left.\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*}\right|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0} = \boldsymbol{0}, \qquad \left.\frac{\partial^2 f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^* \partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}\right|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0} > 0 \tag{5.3.41}$$

则 $\boldsymbol{w}_0$ 是函数 $f(\boldsymbol{w})$ 的严格局部极小点。

对于以复向量为变元的凸函数 $f(\boldsymbol{w})$，它的任何局部极小点 $\boldsymbol{w}_0$ 都是该函数的一个全局极小点。若凸函数 $f(\boldsymbol{w})$ 是可微分的，则满足 $\left.\frac{\partial f(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*}\right|_{\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}_0} = \boldsymbol{0}$ 的平稳点 $\boldsymbol{w}_0$ 是函数 $f(\boldsymbol{w})$ 的一个全局极小点。

例 5.3.11 考查实目标函数 $f(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{w}$，其中，$\boldsymbol{A}$ 是一个对称和正定的矩阵。该二次型目标函数是严格凸的函数。当 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵时，容易求得该目标函数的共轭梯度为 $\nabla_{\boldsymbol{w}^*} f(\boldsymbol{w}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$。令 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{0}$，得唯一的稳定点 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{0}$。进一步地，又可求得目标函数的 Hessian 矩阵 $\nabla_{\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}}[\nabla_{\boldsymbol{w}^*} f(\boldsymbol{w})] = \boldsymbol{A}$。由于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是正定的，故 Hessian 矩阵在 $\boldsymbol{w}$ 的任何点都是正定的。根据上述充分条件立即知，目标函数在原点 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{0}$ 取严格局部极小值。这个唯一的极小值就是目标函数的最小值。

5.4 约束最优化

利用集合的符号，如果函数 $f(x)$ 的变量 x 属于集合 S，则可以使用

$$\min_{x\in S} f(x) \quad 或 \quad \min\{f(x): x\in S\} \tag{5.4.1}$$

表示函数 $f(x)$ 在集合 S 内的最小化。

考虑下面的约束最优化问题：在等式约束

$$c_i(\boldsymbol{x})=0, \quad i\in\mathcal{E} \tag{5.4.2}$$

和不等式约束

$$c_i(\boldsymbol{x})\geqslant 0, \quad i\in\mathcal{I} \tag{5.4.3}$$

的条件下，求最小化问题

$$\min_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x}) \tag{5.4.4}$$

的解 $\boldsymbol{x}$。其中，$\mathcal{E}$ 和 $\mathcal{I}$ 是两个指标集，分别代表满足等式约束和不等式约束的点集。函数 $f(\boldsymbol{x})$ 称为目标函数，并且目标函数和约束函数 $c_i(\boldsymbol{x})$ 都以向量 $\boldsymbol{x}$ 为变元，它们均为光滑的实值函数。

显然，约束最优化问题的任何一个解向量都必须同时满足等式约束和不等式约束条件。换言之，约束最优化问题的任何一个可能的解至少必须是满足等式约束的点 $\boldsymbol{x}\in\mathcal{E}$ 或者是满足不等式约束的点 $\boldsymbol{x}\in\mathcal{I}$。有可能是约束最优化问题的解的点 $\boldsymbol{x}$ 称为一个可行点 (feasible point)。因此，任何一个满足所有等式约束或者所有不等式约束的向量 $\boldsymbol{x}$ 称为可行点。所有可行点组成的集合称为可行集 (feasible set)，定义为

$$\Omega \overset{\text{def}}{=} \mathcal{E}\cup\mathcal{I}=\{\boldsymbol{x}|c_i(\boldsymbol{x})=0,\ i\in\mathcal{E}\ 或\ c_i(\boldsymbol{x})\geqslant 0,\ i\in\mathcal{I}\} \tag{5.4.5}$$

可行集以外的点统称不可行点 (infeasible point)。

利用可行集 Ω，可以将约束最优化问题更紧凑地写作

$$\min_{\boldsymbol{x}\in\Omega} f(\boldsymbol{x}) \tag{5.4.6}$$

如前面两节所述，无约束最优化问题的极小点是由目标函数在该点的一个小的周边邻域的性能刻画的。虽然约束最优化问题的极小点也类似地由目标函数在该点的周边小邻域的性能刻画，但这个邻域只限于包括可行点在内，而无需关注该邻域内的任何不可行点。因此，关于约束最优化问题式 (5.4.6) 的解，有下面的定义 [405],[337]：

(1) 一个可行点 $\boldsymbol{x}_*$ 是最优化问题式 (5.4.6) 的局部解 (local solution)，若存在 $\boldsymbol{x}_*$ 的一个邻域 $\mathcal{N}$，使得 $f(\boldsymbol{x}) \geqslant f(\boldsymbol{x}_*)$ 对 $\boldsymbol{x} \in \mathcal{N} \cap \Omega$ 的所有可行点 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}_*$ 成立。

(2) 一个可行点 $\boldsymbol{x}_*$ 是最优化问题式 (5.4.6) 的严格局部解 (strict local solution)，若存在 $\boldsymbol{x}_*$ 的一个邻域 $\mathcal{N}$，使得 $f(\boldsymbol{x}) > f(\boldsymbol{x}_*)$ 对 $\boldsymbol{x} \in \mathcal{N} \cap \Omega$ 的所有可行点 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}_*$ 成立。

(3) 一个可行点 $\boldsymbol{x}_*$ 是最优化问题式 (5.4.6) 的孤立局部解 (isolated local solution)，若存在 $\boldsymbol{x}_*$ 的一个邻域 $\mathcal{N}$，使得 $\boldsymbol{x}_*$ 是在 $\mathcal{N} \cap \Omega$ 内所有可行点 $\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{x}_*$ 中的唯一局部解。

注意，局部解和严格局部解都有可能有多个，而只有当局部解唯一时，才称其为孤立局部解。

下面分别讨论约束最优化问题的局部解的一阶条件和二阶条件。

5.4.1 局部解的一阶必要条件

约束最优化问题的局部解必须是可行点，但是直接搜索可行点，往往比较困难。不妨将搜索范围适当放宽，即考虑一个比可行集 Ω 更宽的集合。

一个显然的事实是：如果点 $\boldsymbol{x}$ 是可行点，那么它至少应该满足不等式约束中的等式条件。

定义 5.4.1[157] 对于不等式约束集合 $c_i(\boldsymbol{x}) \geqslant 0, i \in \mathcal{I}$，称第 i 个约束 $c_i(\boldsymbol{x}) \geqslant 0$ 是在点 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 的主动约束 (active constraint)，若 $c_i(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$；称 $c_i(\boldsymbol{x}) \geqslant 0$ 是在点 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 的非主动约束 (inactive constraint) 或被动约束 (passive constriant)，若 $c_i(\bar{\boldsymbol{x}}) > 0$；称 $c_i(\boldsymbol{x}) \geqslant 0$ 是在点 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 的违法约束 (violated constraint)，若 $c_i(\bar{\boldsymbol{x}}) < 0$。对于等式约束 $c_i(\boldsymbol{x}) = 0, i \in \mathcal{E}$，称第 i 个等式约束 $c_i(\boldsymbol{x}) = 0$ 是在点 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 的主动约束，若 $c_i(\bar{\boldsymbol{x}}) = 0$；称 $c_i(\boldsymbol{x}) = 0$ 是在点 $\bar{\boldsymbol{x}}$ 的违法约束，若 $c_i(\bar{\boldsymbol{x}}) \neq 0$。

满足等式约束条件式 (5.4.2) 的点集合和不等式约束条件式 (5.4.3) 中的主动点的集合的并集称为约束条件的主动集 (active set)，记作 $\mathcal{A}(\boldsymbol{x})$，即有

$$\mathcal{A}(\boldsymbol{x}) = \mathcal{E} \cup \{i \in \mathcal{I} \mid c_i(\boldsymbol{x}_*) = 0\} \tag{5.4.7}$$

显然，可行集 Ω 只是主动集的一个子集，即 $\Omega \in \mathcal{A}(\boldsymbol{x})$。

主动集中的约束条件的梯度组成一个子集合 $\{\nabla c_i(\boldsymbol{x}) = 0, i \in \mathcal{A}(\boldsymbol{x})\}$，简称主动约束梯度的集合。对这些主动约束梯度，通常需要加上限制条件。

定义 5.4.2 给定一个主动点 $\boldsymbol{x}_*$ 和式 (5.4.7) 定义的主动集 $\mathcal{A}$，称线性无关性约束限制 (linear independence constraint qualification, LICQ) 成立，若主动约束梯度的集合 $\{\nabla c_i(\boldsymbol{x}_*), i \in \mathcal{A}(\boldsymbol{x}_*)\}$ 线性无关。

为了叙述的方便，不妨假定主动集共有 m 个等式约束条件 $c_i(\boldsymbol{x}) = 0, i = 1, 2, \cdots, m$。于是，线性无关性约束限制可叙述为：$m$ 个主动约束梯度 $\nabla c_1(\boldsymbol{x}_*), \nabla c_2(\boldsymbol{x}_*), \cdots, \nabla c_m(\boldsymbol{x}_*)$ 线性无关。

通常，主动约束条件可以写成下面的形式：

$$c_i(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - b_i = 0, \quad i = 1, 2 \cdots, m \tag{5.4.8}$$

式中，$\boldsymbol{a}_i$ 为 $n \times 1$ 常系数向量；b_i 为标量。

若记行向量

$$\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}) = [c_1(\boldsymbol{x}), c_2(\boldsymbol{x}), \cdots, c_m(\boldsymbol{x})] \tag{5.4.9}$$

则可将主动集的 m 个约束条件用向量形式合写为 $\boldsymbol{c}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$，且有

$$\boldsymbol{c}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{0} \tag{5.4.10}$$

式中，$\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_m]$ 为 $n \times m$ 矩阵，$\boldsymbol{b} = [b_1, b_2, \cdots, b_m]^{\mathrm{T}}$ 为向量。

根据定义，主动约束行向量 $\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x})$ 的梯度 (即主动约束梯度) 为

$$\begin{aligned}\nabla \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}) &= [\nabla \boldsymbol{c}_1(\boldsymbol{x}), \nabla \boldsymbol{c}_2(\boldsymbol{x}), \cdots, \nabla \boldsymbol{c}_m(\boldsymbol{x})] \\ &= \begin{bmatrix} \dfrac{\partial c_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \dfrac{\partial c_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} & \cdots & \dfrac{\partial c_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_1} \\ \dfrac{\partial c_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \dfrac{\partial c_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} & \cdots & \dfrac{\partial c_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \dfrac{\partial c_1(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} & \dfrac{\partial c_2(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} & \cdots & \dfrac{\partial c_m(\boldsymbol{x})}{\partial x_n} \end{bmatrix}\end{aligned} \tag{5.4.11}$$

求式 (5.4.10) 的转置关于 $\boldsymbol{x}$ 的梯度，并代入上式，则有

$$\nabla \boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}) = [\nabla \boldsymbol{c}_1(\boldsymbol{x}), \nabla \boldsymbol{c}_2(\boldsymbol{x}), \cdots, \nabla \boldsymbol{c}_m(\boldsymbol{x})] = \boldsymbol{A} \tag{5.4.12}$$

由于线性无关性约束限制保证了主动约束梯度之间的线性无关，所以矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量线性无关，即 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = m$。

一个矩阵的列满足线性无关性的假设称为正则性假设。当矩阵 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x})$ 满足正则性假设时，与之对应的 $\boldsymbol{x}$ 称为正则点 (regular point)。

由 5.1.7 节无约束最优化问题局部极小点的一阶必要条件知，目标函数 $f(\boldsymbol{x})$ 的梯度 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$。然而，对于约束最优化问题而言，并没有必要要求梯度 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$ 在所有方向都成立，而只需要主动点 $\boldsymbol{x}_*$ 处的梯度 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_*)$ 在某个方向 $\Delta\boldsymbol{x}$ 上等于零向量即可。这等价于要求

$$(\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_*) = \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \tag{5.4.13}$$

满足这一条件的方向 $\Delta\boldsymbol{x}$ 称为可行 (搜索) 方向。

如果 $\Delta\boldsymbol{x}$ 是一个可行方向，则 $\boldsymbol{x} + \alpha\Delta\boldsymbol{x}$ ($0 < \alpha \leqslant \delta$，$\delta > 0$) 上的所有点都必须是主动点，即式 (5.4.10) 对 $\boldsymbol{x} + \alpha\Delta\boldsymbol{x}$ 成立，从而有

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x} + \alpha\Delta\boldsymbol{x}) - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{0} \tag{5.4.14}$$

将式 (5.4.10) 代入上式，立即有

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0} \quad 或 \quad (\Delta\boldsymbol{x})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \tag{5.4.15}$$

比较式 (5.4.15) 和式 (5.4.13) 知，目标函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在主动点的梯度 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_*)$ 应该等于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 各列的线性组合，即

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_*)=\nabla_{\boldsymbol{x}}f(\boldsymbol{x}_*)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{\lambda}_* \tag{5.4.16}$$

式中，$\boldsymbol{\lambda}_*$ 是表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 各列线性组合的系数向量。

求解约束最优化问题的有效方法是 Lagrange 乘数法。有意思的是，若令代价函数

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda})=f(\boldsymbol{x})-\sum_{i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}}\lambda_i c_i(\boldsymbol{x}) \tag{5.4.17}$$

则在主动点 $\boldsymbol{x}_*$ 的代价函数为

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{x}_*,\boldsymbol{\lambda}_*)=f(\boldsymbol{x}_*)-\boldsymbol{\lambda}_*^{\mathrm{T}}\boldsymbol{c}(\boldsymbol{x}_*) \tag{5.4.18}$$

式中，$\boldsymbol{\lambda}_*$ 表示与主动点 $\boldsymbol{x}_*$ 对应的 Lagrange 乘数向量。

代价函数关于主动点 $\boldsymbol{x}_*$ 的梯度

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}\mathcal{L}(\boldsymbol{x}_*,\boldsymbol{\lambda}_*)=\nabla_{\boldsymbol{x}}f(\boldsymbol{x}_*)-\nabla_{\boldsymbol{x}}\boldsymbol{c}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}_*)\boldsymbol{\lambda}_*$$

将式 (5.4.16) 和式 (5.4.12) 分别代入上式，立即得

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}\mathcal{L}(\boldsymbol{x}_*,\boldsymbol{\lambda}_*)=\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_*)-\boldsymbol{A}\boldsymbol{\lambda}_*=\boldsymbol{0} \tag{5.4.19}$$

这就是 Lagrange 代价函数梯度在主动点 $\boldsymbol{x}_*$ 必须满足的一阶必要条件。

将 Lagrange 代价函数梯度的一阶必要条件式 (5.4.19) 与其他条件组合在一起，即可得到约束最优化问题的局部解的一阶必要条件，如下所述。

定理 5.4.1 (一阶必要条件)　假设 $\boldsymbol{x}_*$ 是具有等式约束式 (5.4.2) 和不等式约束式 (5.4.3) 的最小化问题式 (5.4.4) 的局部解，并且线性无关性约束限制在 $\boldsymbol{x}_*$ 点成立。令 $\mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda})=f(\boldsymbol{x})-\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}c(\boldsymbol{x})$ 为 Lagrange 函数，则存在一个 Lagrange 乘数向量 $\boldsymbol{\lambda}_*$，其元素为 $\lambda_i^*, i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I}$，使得以下 5 个条件在 $(\boldsymbol{x}_*,\boldsymbol{\lambda}_*)$ 成立：

$$c_i(\boldsymbol{x}_*)=0, \quad \forall i\in\mathcal{E} \tag{5.4.20}$$

$$c_i(\boldsymbol{x}_*)\geqslant 0, \quad \forall i\in\mathcal{I} \tag{5.4.21}$$

$$\nabla_{\boldsymbol{x}}\mathcal{L}(\boldsymbol{x}_*,\boldsymbol{\lambda}_*)=\boldsymbol{0} \tag{5.4.22}$$

$$\lambda_*(i)\geqslant 0, \quad \forall i\in\mathcal{I} \tag{5.4.23}$$

$$\lambda_*(i)c_i(\boldsymbol{x}_*)=0, \quad \forall i\in\mathcal{E}\cup\mathcal{I} \quad (互补性) \tag{5.4.24}$$

以上 5 个条件合称一阶 Karush-Kuhn-Tucker 条件，简称 KKT 条件。每个满足 KKT 条件的点称为一个 KKT 点。

证明 第一和第二个条件分别是等式约束条件式 (5.4.2) 和不等式约束式 (5.4.3)，第三个条件即是式 (5.4.19)。其他两个条件的证明见文献 [337]。

在运筹学文献中，常称 $\boldsymbol{x}$ 为原始变量 (primal variables)，称 $\boldsymbol{\lambda}$ 为对偶变量 (dual variables)。

有必要指出，在一些文献 (例如文献 [157] 等) 中，KKT 条件是作为定义形式给出的。下面对 KKT 条件的解释 [157] 有助于进一步理解 KKT 条件的必要性。

(1) 第一和第二个 KKT 条件称为可行性，表明每一个 KKT 点 $\boldsymbol{x}_*$ 都是可行点。

(2) 第三个 KKT 条件称为平稳性，表明每一个 KKT 点 $\boldsymbol{x}_*$ 相对于 Lagrange 函数 $\mathcal{L}(\boldsymbol{x},\boldsymbol{\lambda})$ 的 $\boldsymbol{x}$ 都是平稳点。

(3) 第四个 KKT 条件称为不等式 Lagrange 乘数向量的非负性，表明与每一个 KKT 点 $\boldsymbol{x}_*$ 对应的 Lagrange 乘数向量 $\boldsymbol{\lambda}$ 的每一个分量必须是非负的，才能保证求出目标函数 $f(\boldsymbol{x})$ 有可能在点 $\boldsymbol{x}_*$ 取极小值。

(4) 第五个 KKT 条件称为不等式约束的互补性，描述了在每一个 KKT 点 $\boldsymbol{x}_*$，不等式约束条件 $c_i(\boldsymbol{x}_*)$ 与 Lagrange 乘数 $\lambda_*(i)$ 之间的互补关系。为了满足互补性，与非主动约束对应的 Lagrange 乘数向量 $\boldsymbol{\lambda}$ 的每一个分量 $\lambda_*(i)$ 都必须等于零，这意味着目标函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在 KKT 点 $\boldsymbol{x}_*$ 的梯度必须是主动约束梯度的线性组合，即

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_*) = [\boldsymbol{J}_{\mathcal{A}}(\boldsymbol{x}_*)]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{A}}^* \tag{5.4.25}$$

式中，$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_*) = \nabla_{\boldsymbol{x}} f(\boldsymbol{x})|_{\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_*}$ 表示目标函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在 KKT 点 $\boldsymbol{x}_*$ 的梯度向量，$\boldsymbol{J}_{\mathcal{A}}(\boldsymbol{x}_*)$ 代表主动约束的 Jacobi 矩阵，$\boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{A}}^*$ 表示主动约束的 Lagrange 乘数向量。

需要指出的是，满足式 (5.4.25) 的 Lagrange 乘数向量可能有很多，甚至无穷多个。因此，对 Lagrange 乘数向量，还需要作出进一步约束，这就引出了可接受的 Lagrange 乘数向量的概念。

定义 5.4.3 [157] 对含有等式约束和不等式约束的最优化问题，给定一个 KKT 点 $\boldsymbol{x}_*$，则可接受的 Lagrange 乘数向量的集合定义为

$$\mathcal{M}_{\lambda}(\boldsymbol{x}_*) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{\boldsymbol{\lambda} \in R^m:\ \boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}_*) = [\boldsymbol{J}_{\mathcal{A}}(\boldsymbol{x}_*)]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda},\ \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{I}} \geqslant 0,\ \text{和}\ \boldsymbol{c}_{\mathcal{I}}(\boldsymbol{x}_*) \odot \boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{I}} = 0\right\} \tag{5.4.26}$$

式中，$\mathcal{I}$ 是不等式约束 $c_i(\boldsymbol{x}_*) \geqslant 0$ 的指标集合；$\boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{I}}$ 表示向量 $\boldsymbol{\lambda}_{\mathcal{I}}$ 的各个元素大于或等于零；$\boldsymbol{x} \odot \boldsymbol{y}$ 表示两个向量的元素乘积，即其元素为 $x_i y_i$。

定义 5.4.4 [157] 第 i 个不等式约束 $c_i(\boldsymbol{x}) \geqslant 0$ 称为在 KKT 点 $\boldsymbol{x}_*$ 的强主动约束 (strongly active constraint)，若 $\in \mathcal{A}(\boldsymbol{x}_*)$，并至少存在一个 Lagrange 乘数向量 $\boldsymbol{\lambda}_* \in \mathcal{M}_{\lambda}$ 满足 $\lambda_*(i) > 0$。类似地，第 i 个约束称为弱主动约束 (weakly active constraint)，若 $i \in \mathcal{A}(\boldsymbol{x}_*)$ 和 $\lambda_i = 0$ 对所有 $\boldsymbol{\lambda} \in \mathcal{M}_{\lambda}$ 成立。此时，又称第 i 个不等式约束具有一个 Lagrange 零乘子。

5.4.2 局部解的二阶条件

KKT 条件给出了约束最优化问题局部解的一阶必要条件。下面两个定理分别给出了局部解的二阶必要条件和二阶充分条件。

定理 5.4.2 (二阶必要条件) 假设 $\boldsymbol{x}_*$ 是约束最优化问题的局部解，并且线性无关性约束限制条件成立。令 $\boldsymbol{\lambda}_*$ 是满足 KKT 条件的 Lagrange 乘数向量，且

$$\boldsymbol{w} \in F(\boldsymbol{\lambda}_*) \Longleftrightarrow \begin{cases} [\nabla_{\boldsymbol{x}} c_i(\boldsymbol{x}_*)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{w} = 0, & \forall i \in \mathcal{E} \\ [\nabla_{\boldsymbol{x}} c_i(\boldsymbol{x}_*)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{w} = 0, & \forall i \in \mathcal{A} \cap \mathcal{I}, \text{ 且 } \lambda_*(i) > 0 \\ [\nabla_{\boldsymbol{x}} c_i(\boldsymbol{x}_*)]^{\mathrm{T}} \boldsymbol{w} \geqslant 0, & \forall i \in \mathcal{A} \cap \mathcal{I}, \text{ 且 } \lambda_*(i) = 0 \end{cases} \tag{5.4.27}$$

则

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \nabla_{\boldsymbol{x}}^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{\lambda}_*) \boldsymbol{w} \geqslant 0, \quad \forall \boldsymbol{w} \in F(\boldsymbol{\lambda}_*) \tag{5.4.28}$$

证明 参见文献 [337, pp.343~344]。

定理 5.4.3 (二阶充分条件) 假设对某个可行点 $\boldsymbol{x}_*$，存在一 Lagrange 乘子向量 $\boldsymbol{\lambda}_*$ 满足 KKT 条件。若

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \nabla_{\boldsymbol{x}}^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{\lambda}_*) \boldsymbol{w} > 0, \quad \forall \boldsymbol{w} \in F(\boldsymbol{\lambda}_*) \tag{5.4.29}$$

则 $\boldsymbol{x}_*$ 是约束最优化问题的严格局部解。

证明 参见文献 [337, pp.345~346]。

表 5.4.1 列出了无约束和有约束最优化问题之间的比较。

表 5.4.1 无约束最优化和约束最优化问题的比较

类 型	无约束最优化	约束最优化
目标函数	$f(\boldsymbol{x})$	$f(\boldsymbol{x})$
约束条件	无	$\begin{cases} c_i(\boldsymbol{x}) = 0, & i \in \mathcal{E} \\ c_i(\boldsymbol{x}) \geqslant 0, & i \in \mathcal{I} \end{cases}$
Lagrange 函数	无	$\mathcal{L}(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{\lambda}) = f(\boldsymbol{x}) - \sum_{i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}} \lambda_i c_i(\boldsymbol{x})$
局部解的一阶必要条件	$\nabla f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$	$\nabla_{\boldsymbol{x}} \mathcal{L}(\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{\lambda}_*) = 0$ $c_i(\boldsymbol{x}_*) = 0, \ \forall i \in \mathcal{E}$ $c_i(\boldsymbol{x}_*) \geqslant 0, \ \forall i \in \mathcal{I}$ $\lambda_*(i) \geqslant 0, \ \forall i \in \mathcal{I}$ $\lambda_*(i) c_i(\boldsymbol{x}_*) = 0, \ \forall i \in \mathcal{E} \cup \mathcal{I}$
局部解的二阶必要条件	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{x} \geqslant 0$	$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \nabla_{\boldsymbol{x}}^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{\lambda}_*) \boldsymbol{w} \geqslant 0$
严格局部解的二阶充分条件	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \nabla^2 f(\boldsymbol{x}) \boldsymbol{x} > 0$	$\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}} \nabla_{\boldsymbol{x}}^2 \mathcal{L}(\boldsymbol{x}_*, \boldsymbol{\lambda}_*) \boldsymbol{w} > 0$

下面举一个约束最优化问题的例子。

例 5.4.1 令复值观测数据向量由

$$\boldsymbol{y}=\alpha\boldsymbol{x}+\boldsymbol{v}$$

给出，式中，α 为标量；$\boldsymbol{x}$ 表示一确定性向量；$\boldsymbol{v}$ 为一随机噪声向量，具有零均值向量、协方差矩阵 $\boldsymbol{R}_v=\mathrm{E}\{\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\}$。若令

$$\hat{\alpha}=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}$$

并且希望 $\hat{\alpha}$ 是未知参数的具有最小方差的无偏估计子 (称为最优线性无偏估计子)，求最优滤波器 $\boldsymbol{w}$。

解 由于估计子 $\hat{\alpha}$ 必须是无偏的，故

$$\mathrm{E}\{\hat{\alpha}\}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}\}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(\alpha\boldsymbol{x}+\boldsymbol{v})\}=\alpha\mathrm{E}\{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\}=\alpha\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\alpha$$

式中，利用了确定性滤波器向量 $\boldsymbol{w}$ 与随机噪声向量 $\boldsymbol{v}$ 正交。由上式得约束条件

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=1$$

无偏估计子的方差

$$\mathrm{var}(\hat{\alpha})=\mathrm{var}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})=\mathrm{var}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v})=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\mathrm{E}\{\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\}\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_v\boldsymbol{w}$$

于是，最优线性无偏估计子的设计准则可以用约束最优化问题来描述：

$$\min\,\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_v\boldsymbol{w}$$

约束条件为 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=1$。利用 Lagrange 乘数法，构造代价函数或目标函数

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{w},\lambda)=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_v\boldsymbol{w}+\lambda(1-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})$$

令共轭梯度为零向量，有

$$\frac{\partial\mathcal{L}(\boldsymbol{w},\lambda)}{\partial\boldsymbol{w}^*}=\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{w}^*}\left[\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_v\boldsymbol{w}+\lambda(1-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})\right]=\boldsymbol{R}_v\boldsymbol{w}-\lambda\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$$

得 $\boldsymbol{w}=\lambda\boldsymbol{R}_v^{-1}\boldsymbol{x}$。将这一结果代入约束条件，得 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_v^{-1}\boldsymbol{x}=1$，即有

$$\lambda=\frac{1}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_v^{-1}\boldsymbol{x}}$$

于是，有

$$\boldsymbol{w}=\lambda\boldsymbol{R}_v^{-1}\boldsymbol{x}=\frac{\boldsymbol{R}_v^{-1}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_v^{-1}\boldsymbol{x}}$$

这即是最优线性无偏估计子的最优滤波器。

5.4.3 线性约束的消去

除了 Lagrange 乘数法，具有等式约束的最优化问题也可以通过约束条件的消去，变成一个无约束的最优化问题求解。

以等式约束的最优化问题为例：

$$\min f(x_1, x_2, x_3, x_4)$$

约束条件为

$$x_2 + x_3^2 - x_4 x_3 = 0$$
$$-x_1 + x_4 + x_3^2 = 0$$

显然，通过令

$$x_1 = x_4 + x_3^2, \qquad x_2 = x_4 x_3 - x_3^2$$

则等式约束的最优化问题即变成了下面的无约束最优化问题：

$$\min f(x_3, x_4) = f(x_4 + x_3^2, x_4 x_3 - x_3^2, x_3, x_4)$$

下面考虑具有一组线性等式约束的非线性函数的最优化：

$$\min f(\boldsymbol{x}), \qquad \text{服从约束}\ \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \tag{5.4.30}$$

式中，$\boldsymbol{A}$ 是一个 $m \times n$ 矩阵，且 $m \leqslant n$。假定 $\boldsymbol{A}$ 为满行秩矩阵。在这一假设下，即可求出 $\boldsymbol{A}$ 的 m 个线性无关的列向量。用这些列向量组成一个 $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$，并定义 $n \times n$ 置换矩阵 $\boldsymbol{P}$，使得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 经过列旋转后，其前面 m 列线性无关。换言之，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是 $\boldsymbol{AP}$ 的前 m 列，即有

$$\boldsymbol{AP} = [\boldsymbol{B}, \boldsymbol{N}] \tag{5.4.31}$$

式中，$\boldsymbol{N}$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 除去其 m 个线性无关列后剩下的 $n - m$ 列。

定义子向量 $\boldsymbol{x}_B \in R^m$ 和 $\boldsymbol{x}_N \in R^{n-m}$，它们由

$$\boldsymbol{Px} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_B \\ \boldsymbol{x}_N \end{bmatrix} \tag{5.4.32}$$

给出。式中，向量 $\boldsymbol{x}_B$ 和矩阵 $\boldsymbol{B}$ 分别称为基本变量 (basic variables) 和基矩阵 (basis matrix) [337, p.428]。注意，基矩阵与由基本向量生成的基本矩阵或反映初等行变换的基本矩阵属于不同的概念。

由于置换矩阵满足 $\boldsymbol{PP}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$，故可将线性约束条件 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 改写为

$$\boldsymbol{b} = \boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{AP}(\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{Bx}_B + \boldsymbol{Nx}_N$$

于是，基本变量 $\boldsymbol{x}_B$ 可以表示为

$$\boldsymbol{x}_B = \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b} - \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{Nx}_N \tag{5.4.33}$$

因此，满足约束 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的可行点就可以用下列方法计算：选择 $\boldsymbol{x}_N$ 的任意一个值，然后根据式 (5.4.33) 得到 $\boldsymbol{x}_B$。现在，等式约束的最优化问题式 (5.4.30) 即变成了无约束的最优化问题：

$$\min_{\boldsymbol{x}_N} J(\boldsymbol{x}_N) \stackrel{\text{def}}{=} f\left(\boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{b}-\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{N}\boldsymbol{x}_N\\ \boldsymbol{x}_N\end{bmatrix}\right) \tag{5.4.34}$$

式 (5.4.33) 称为变量的直接消去。

上述讨论 [337, p.428] 表明，从数学的观点看，具有线性等式约束的非线性最优化问题与一个无约束的最优化问题是相同的。

5.4.4 线性约束的二次规划

现在讨论另外一种常见的约束优化问题。在应用中，经常会遇到下面的等式约束优化问题：

$$\min_{\boldsymbol{x}} J(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d} \tag{5.4.35}$$

约束条件为

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b} \tag{5.4.36}$$

式中，$\boldsymbol{A}$ 是 $m\times n$ 矩阵。假定 $\boldsymbol{A}$ 具有满行秩 (即 $\text{rank}\boldsymbol{A}=m$)。式 (5.4.35) 的优化问题称为线性约束的二次规划问题。

注意，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满行秩的假设意味着等式约束 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 中的 m 个约束条件线性无关。

利用 Lagrange 乘数法，定义目标函数

$$q(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{x}+\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}+\boldsymbol{\lambda}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax})$$

则由 $\partial q(\boldsymbol{x})/\partial\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 和 $\partial q(\boldsymbol{x})/\partial\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$，立即得联立方程

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{G} & -\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_*\\ \boldsymbol{\lambda}^*\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}-\boldsymbol{d}\\ \boldsymbol{b}\end{bmatrix} \tag{5.4.37}$$

式中，$\boldsymbol{x}_*$ 和 $\boldsymbol{\lambda}^*$ 分别表示二次规划问题的最优解向量和最优 Lagrange 乘数向量。

令 $\boldsymbol{x}$ 是线性约束 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的任意一个解向量，并作变量代换 $\boldsymbol{x}_*=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{p}$，则式 (5.4.37) 可以等价写作

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{G} & \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}-\boldsymbol{p}\\ \boldsymbol{\lambda}_*\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}\\ \boldsymbol{c}\end{bmatrix} \tag{5.4.38}$$

式中

$$\boldsymbol{c}=\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b},\qquad \boldsymbol{h}=\boldsymbol{d}+\boldsymbol{Gx},\qquad \boldsymbol{p}=\boldsymbol{x}_*-\boldsymbol{x} \tag{5.4.39}$$

矩阵

$$\boldsymbol{K}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{G} & \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix} \tag{5.4.40}$$

称为 Karush-Kuhn-Tucker (KKT) 矩阵，而式 (5.4.38) 称为 KKT 方程组 (KKT system)。

因此，等式约束的二次规划问题现在转变为求解 KKT 方程组 (5.4.38) 得到 $\boldsymbol{p}$。若 $\boldsymbol{x}$ 是等式约束 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的任意一个解向量，则等式约束二次规划问题的解由 $\boldsymbol{x}_*=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{p}$ 直接给出。

下面介绍求解 KKT 方程组的三种方法：秩空间方法、对称不定分解方法和零空间方法 [337, pp.448~451]。

1. 秩空间方法

如果 KKT 矩阵 $\boldsymbol{K}$ 和子矩阵 $\boldsymbol{G}$ 均非奇异，则根据分块矩阵的求逆公式 (见 1.7 节)，可以求出 KKT 矩阵的逆矩阵

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{G} & \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{A} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{C} & \boldsymbol{E} \\ \boldsymbol{E}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{F} \end{bmatrix} \tag{5.4.41}$$

式中

$$\begin{aligned} \boldsymbol{C} &= \boldsymbol{G}^{-1} - \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}^{-1} \\ \boldsymbol{E} &= \boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{-1} \\ \boldsymbol{F} &= -(\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{-1} \end{aligned}$$

于是，KKT 方程组 (5.4.38) 的解为

$$\begin{bmatrix} -\boldsymbol{p} \\ \boldsymbol{\lambda}_* \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{G} & \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{A} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{h} \\ \boldsymbol{c} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{C} & \boldsymbol{E} \\ \boldsymbol{E}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{F} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{h} \\ \boldsymbol{c} \end{bmatrix}$$

即有

$$\boldsymbol{p} = -(\boldsymbol{C}\boldsymbol{h} + \boldsymbol{E}\boldsymbol{c}) \tag{5.4.42}$$

从而得到等式约束的二次规划问题式 (5.4.35) 的解 $\boldsymbol{x}_* = \boldsymbol{p} + \boldsymbol{x}$，其中，$\boldsymbol{x}$ 是等式约束方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的任意一个解向量。

然而，计算式 (5.4.4) 需要矩阵求逆和比较多的矩阵乘法。当 KKT 矩阵的子矩阵 $\boldsymbol{G}$ 非奇异时，由于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满行秩的假设，易知 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 非奇异，即 KKT 矩阵非奇异。在子矩阵 $\boldsymbol{G}$ 非奇异的情况下，可以使用 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}^{-1}$ 左乘 KKT 方程组的第一个方程，然后再与第二个方程相减，即得

$$(\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{\lambda}_* = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}^{-1})\boldsymbol{h} - \boldsymbol{c} \tag{5.4.43}$$

利用初等行变换，可以从上式中求出 Lagrange 乘数向量 $\boldsymbol{\lambda}_*$。接着，又可以利用初等行变换通过求解 KKT 方程组第一个方程的变型

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{p} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\lambda}_* - \boldsymbol{h} \tag{5.4.44}$$

恢复 $\boldsymbol{p}$。这一方法称为秩空间方法 [337, p.449]。

2. 对称不定分解方法

二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 既可能取正值，也可能取负值的对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为不定矩阵。若 KKT 矩阵 $\boldsymbol{K}$ 不定时，可以对其进行矩阵分解：

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{B}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}} \tag{5.4.45}$$

式中，$\boldsymbol{P}$ 为置换矩阵；$\boldsymbol{L}$ 为单位下三角矩阵；$\boldsymbol{B}$ 是一个块对角矩阵，每个子块为 1×1 矩阵或者 2×2 矩阵。式 (5.4.45) 的分解称为对称不定分解 (symmetric indefinite factorization)。

用 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$ 分别左乘和右乘式 (5.4.45) 两边，并利用置换矩阵的正交性 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$，可以将对称不定分解式 (5.4.45) 写成

$$\boldsymbol{K}=\boldsymbol{PLBL}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}} \tag{5.4.46}$$

将式 (5.4.46) 代入式 (5.4.38)，即有

$$\boldsymbol{PLBL}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}-\boldsymbol{p}\\ \boldsymbol{\lambda}_*\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}\\ \boldsymbol{c}\end{bmatrix} \tag{5.4.47}$$

用 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}$ 左乘式 (5.4.47) 两边，得

$$\boldsymbol{LBL}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}-\boldsymbol{p}\\ \boldsymbol{\lambda}_*\end{bmatrix}=\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}\\ \boldsymbol{c}\end{bmatrix} \tag{5.4.48}$$

上式启迪了求解 KKT 方程组 (5.4.38) 的对称不定分解算法如下。

算法 5.4.1 (KKT 方程组求解的对称不定分解算法) [337, p.448]

步骤 1 按照式 (5.4.40) 构造 KKT 矩阵 $\boldsymbol{K}$，并求 $\boldsymbol{K}$ 的对称不定分解 (有关算法可参考文献 [337, Section 4.4])，得到置换矩阵 $\boldsymbol{P}$，单位下三角矩阵 $\boldsymbol{L}$ 和块对角矩阵 $\boldsymbol{B}$。

步骤 2 求解方程 $\boldsymbol{Ly}=\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}\\ \boldsymbol{c}\end{bmatrix}$，得到解向量 $\boldsymbol{y}$。

步骤 3 求解方程 $\boldsymbol{B}\hat{\boldsymbol{y}}=\boldsymbol{y}$，得到 $\hat{\boldsymbol{y}}$。

步骤 4 求解方程 $\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{y}}=\hat{\boldsymbol{y}}$，得到 $\bar{\boldsymbol{y}}$。

步骤 5 KKT 方程组的解为

$$\begin{bmatrix}-\boldsymbol{p}\\ \boldsymbol{\lambda}^*\end{bmatrix}=\boldsymbol{P}\bar{\boldsymbol{y}}$$

最后，通过求解约束方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，得到任意一个解向量 $\boldsymbol{x}$，则等式约束的二次规划问题式 (5.4.35) 的解由 $\boldsymbol{x}_*=\boldsymbol{x}+\boldsymbol{p}$ 给出。

3. 零空间方法

令矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 是满足 $\boldsymbol{AZ}=\boldsymbol{O}$ 的解，即 $Z=\mathrm{Span}(\boldsymbol{Z})=\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的零空间。因此，给定 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，则可以利用奇异值分解，得到张成零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})$ 的一组基向量，它们组成 $n\times(n-m)$ 矩阵 $\boldsymbol{Z}$。

选择一个 $n\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{Y}$，使得 $n\times n$ 矩阵 $[\boldsymbol{Y},\boldsymbol{Z}]$ 非奇异。考虑将 KKT 方程组 (5.4.38) 中的向量 $\boldsymbol{p}$ 分解为

$$\boldsymbol{p}=\boldsymbol{Y}\boldsymbol{p}_Y+\boldsymbol{Z}\boldsymbol{p}_Z \tag{5.4.49}$$

将上式代入 KKT 方程组 (5.4.38) 的第二个方程，并注意到 $\boldsymbol{AZ}=\boldsymbol{O}$，立即得

$$(\boldsymbol{AY})\boldsymbol{p}_Y=-\boldsymbol{c} \tag{5.4.50}$$

由于假设 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满行秩，即 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = m$，并且 $n \times n$ 矩阵 $[\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}]$ 非奇异，故有 $\boldsymbol{A}[\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}] = [\boldsymbol{AY}, \boldsymbol{O}]$ 的秩为 m。这意味着 $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{AY}$ 非奇异。因此，可以求出

$$\boldsymbol{p}_Y = -(\boldsymbol{AY})^{-1}\boldsymbol{c} \tag{5.4.51}$$

另一方面，将式 (5.4.49) 代入式 (5.4.38) 的第一个方程，又有

$$-\boldsymbol{GY}\boldsymbol{p}_Y - \boldsymbol{GZ}\boldsymbol{p}_Z + \boldsymbol{A}^{\text{T}}\boldsymbol{\lambda}^* = \boldsymbol{h}$$

用 $\boldsymbol{Z}^{\text{T}}$ 左乘上式两边，得到

$$(\boldsymbol{Z}^{\text{T}}\boldsymbol{GZ})\boldsymbol{p}_Z = -\left(\boldsymbol{Z}^{\text{T}}\boldsymbol{GY}\boldsymbol{p}_Y + \boldsymbol{Z}^{\text{T}}\boldsymbol{h}\right) \tag{5.4.52}$$

若假定矩阵 $\boldsymbol{Z}^{\text{T}}\boldsymbol{GZ}$ 正定，则通过求解式 (5.4.52) 得到 $\boldsymbol{p}_Z$，进而得到 $\boldsymbol{p} = \boldsymbol{Y}\boldsymbol{p}_Y + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{p}_Z$。

求解 KKT 方程组 (5.4.38) 的上述三种方法的比较如下：

(1) 秩空间方法需要假定矩阵 $\boldsymbol{G}$ 非奇异；

(2) 对称不定分解适用于矩阵 $\boldsymbol{G}$ 奇异的情况，但 KKT 矩阵 $\boldsymbol{K}$ 的对称不定分解是一个关键问题；

(3) 零空间方法也适用于 $\boldsymbol{G}$ 奇异的情况，但需要选择矩阵 $\boldsymbol{Y}$ 使得 $[\boldsymbol{Y}, \boldsymbol{Z}]$ 非奇异，并且需要假设 $\boldsymbol{Z}^{\text{T}}\boldsymbol{GZ}$ 正定。

下面举一个矩阵最优低秩逼近的经典例子 [140]，说明如何将矩阵微分应用于求解约束最优化问题。

令 $\boldsymbol{X}$ 是一个已知的 $m \times n$ 矩阵，其秩 $\text{rank}(\boldsymbol{X}) = r$。现在希望求一个 $n \times r$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和一个 $m \times r$ 矩阵 $\boldsymbol{Z}$ 是下列约束最优化问题的解：

$$\min f(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{Z}) = \text{tr}\left((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})\right) \tag{5.4.53}$$

约束条件为 $\boldsymbol{A}^{\text{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$。

令 $\boldsymbol{L}$ 是一个 $r \times r$ Lagrange 乘数矩阵，并定义 Lagrange 函数

$$J(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{Z}, \boldsymbol{L}) = \frac{1}{2}\text{tr}\left((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})\right) - \frac{1}{2}\text{tr}\left(\boldsymbol{L}(\boldsymbol{AA}^{\text{T}} - \boldsymbol{I})\right) \tag{5.4.54}$$

以矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 作为独立变元，求 Lagrange 函数的第一种微分，得

$$\begin{aligned}
\text{d}_1(J(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{Z}, \boldsymbol{L})) &= \text{tr}\left((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})\text{d}(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})^{\text{T}}\right) - \frac{1}{2}\text{tr}\left(\boldsymbol{L}[(\text{d}\boldsymbol{A})^{\text{T}}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\text{T}}\text{d}\boldsymbol{A}]\right) \\
&= -\text{tr}\left((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})\boldsymbol{A}(\text{d}\boldsymbol{Z})^{\text{T}}\right) - \text{tr}\left((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})(\text{d}\boldsymbol{A})\boldsymbol{Z}^{\text{T}}\right) - \\
&\quad \text{tr}(\boldsymbol{LA}^{\text{T}}\text{d}\boldsymbol{A}) \\
&= -\text{tr}\left((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})\boldsymbol{A}(\text{d}\boldsymbol{Z})^{\text{T}}\right) - \text{tr}\left((\boldsymbol{Z}^{\text{T}}\boldsymbol{X} - \boldsymbol{Z}^{\text{T}}\boldsymbol{ZA}^{\text{T}} + \boldsymbol{LA}^{\text{T}})\text{d}\boldsymbol{A}\right)
\end{aligned} \tag{5.4.55}$$

由此得梯度矩阵

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{Z}, \boldsymbol{L})}{\partial \boldsymbol{Z}^{\text{T}}} = -\left((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{ZA}^{\text{T}})\boldsymbol{A}\right)^{\text{T}}$$

$$\frac{\partial J(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{Z}, \boldsymbol{L})}{\partial \boldsymbol{A}} = -\left(\boldsymbol{Z}^{\text{T}}\boldsymbol{X} - \boldsymbol{Z}^{\text{T}}\boldsymbol{ZA}^{\text{T}} + \boldsymbol{LA}^{\text{T}}\right)^{\text{T}}$$

令它们等于零矩阵，即得

$$(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{Z}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O} \tag{5.4.56}$$

$$\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}-\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{L}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{O} \tag{5.4.57}$$

以 Lagrange 乘数矩阵 $\boldsymbol{L}$ 作为独立变元，又可求得 Lagrange 函数的第二种微分

$$\mathrm{d}_2(J(\boldsymbol{A},\boldsymbol{Z},\boldsymbol{L}))=-(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I})$$

由此得梯度矩阵

$$\frac{J(\boldsymbol{A},\boldsymbol{Z},\boldsymbol{L})}{\partial\boldsymbol{L}}=-(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I})^{\mathrm{T}}$$

令其等于零矩阵，则有

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I} \tag{5.4.58}$$

即 $\boldsymbol{A}$ 是一个半正交矩阵。

由式 (5.4.56) 和式 (5.4.58) 得

$$\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{A} \tag{5.4.59}$$

用 $\boldsymbol{A}$ 右乘式 (5.4.57) 两边，再利用式 (5.4.58) 和式 (5.4.59)，得 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Z}-\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O}$。因此，式 (5.4.57) 可以写成

$$(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}) \tag{5.4.60}$$

令 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}$ 的特征值分解为

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A})\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{\Sigma} \tag{5.4.61}$$

式中，$\boldsymbol{Q}$ 为 $r\times r$ 正交矩阵，$\boldsymbol{\Sigma}$ 为 $r\times r$ 对角矩阵，它包含了矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}$ 的特征值。

不妨令 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}$，则式 (5.4.61) 可以写作

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})\boldsymbol{P}=\boldsymbol{\Sigma} \tag{5.4.62}$$

由于 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}$，故式 (5.4.62) 表明，对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的元素实际上就是矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的 r 个特征值。

现在将 $\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}$ 代入实值函数 $f(\boldsymbol{A},\boldsymbol{Z})$，得

$$f(\boldsymbol{A},\boldsymbol{Z})=\mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}-\boldsymbol{Z}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{X}-\boldsymbol{Z}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\right)=\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})-\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}) \tag{5.4.63}$$

显然，为了最小化 $f(\boldsymbol{A},\boldsymbol{Z})$，就必须使 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma})$ 最大化。换言之，对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的 r 个元素必须是矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的 r 个最大特征值。此时，式 (5.4.62) 中的矩阵 $\boldsymbol{P}$ 由 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 与这些特征值对应的 r 个主 (要) 特征向量组成。

由 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}$ 知，任何满足 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 都可以使得 $\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}$ 最优逼近已知矩阵 $\boldsymbol{X}$，其中，$\boldsymbol{Q}$ 是 $r\times r$ 任意正交矩阵。为简单计，令 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}$，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 由 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的 r 个 $n\times 1$ 主特征向量组成时，$\boldsymbol{Z}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的最优逼近，并且约束最优化函数 $f(\boldsymbol{A},\boldsymbol{Z})$ 的最小值等于矩阵 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}$ 的 $n-r$ 个小特征值之和。这一逼近方法称为矩阵的最优低秩逼近，是 Eckart 与 Young 于 1936 年得到的 [140]。

5.5 梯度算法

5.1 节和 5.3 节分别分析了梯度、共轭梯度与无约束最优化问题的局部解之间的关系。5.4 又讨论了约束最优化问题求解的一般理论。从本节起，我们将转入求解最优化问题的具体算法。

5.5.1 统计逼近法

以自适应滤波和系统辨识为讨论对象，估计一个未知装置或设备的模型参数，以给出有关系统动态特性的足够信息。假定系统模型可以用差分方程描述：

$$y(n)=\sum_{i=0}^{M-1}c_0^*(i)u(n-i)+v(n) \tag{5.5.1}$$

式中，$u(n)$ 和 $y(n)$ 分别是系统的输入和输出，都是可以观测的；$c_0(i),i=0,1,\cdots,M-1$ 表示系统模型参数；$v(n)$ 代表系统的加性扰动或噪声，它们都是未知的或者不可观测的。

假定系统模型的阶数 M 已知，现在希望设计一个 M 阶滤波器，其参数为 $w(i)$，使得滤波器的输出

$$\hat{y}(n)=\sum_{i=0}^{M-1}w^*(i)u(n-i)=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}(n) \tag{5.5.2}$$

能够逼近实际系统的期望输出 (即无干扰或噪声的输出)。式中

$$\boldsymbol{w}=[w(0),w(1),\cdots,w(M-1)]^{\mathrm{T}} \tag{5.5.3}$$

$$\boldsymbol{u}(n)=[u(n),u(n-1),\cdots,u(n-M+1)]^{\mathrm{T}} \tag{5.5.4}$$

定义误差信号

$$e(n)=y(n)-\hat{y}(n)=y(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}(n) \tag{5.5.5}$$

希望设计滤波器抽头系数 $w_i,i=0,1,\cdots,M-1$，使得均方误差最小化，即

$$\min J(\boldsymbol{w})=\mathrm{E}\{|e(n)|^2\}=\mathrm{E}\left\{\left|y(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}(n)\right|^2\right\} \tag{5.5.6}$$

注意到共轭梯度

$$\begin{aligned}\nabla_{\boldsymbol{w}^*}J(\boldsymbol{w})&=\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{w}^*}\mathrm{E}\left\{\left[y(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}(n)\right]\left[y(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}(n)\right]^*\right\}\\&=\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{w}^*}\left[\mathrm{E}\{|y(n)|^2\}+\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\mathrm{E}\{\boldsymbol{u}(n)\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\}\boldsymbol{w}-\right.\\&\quad\left.\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\mathrm{E}\{y^*(n)\boldsymbol{u}(n)\}-\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\mathrm{E}\{y(n)\boldsymbol{u}^*(n)\}\right]\end{aligned}$$

即有

$$\nabla_{\boldsymbol{w}^*}J(\boldsymbol{w})=\mathrm{E}\{\boldsymbol{u}(n)\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\}\boldsymbol{w}-\mathrm{E}\{y^*(n)\boldsymbol{u}(n)\}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{w}-\boldsymbol{r} \tag{5.5.7}$$

令 $\nabla_{\boldsymbol{w}^*}J(\boldsymbol{w})=\boldsymbol{0}$，便得到

$$\boldsymbol{w}_{\text{opt}}=\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{r} \tag{5.5.8}$$

式中

$$\boldsymbol{R}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{u}(n)\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\} \tag{5.5.9}$$

$$\boldsymbol{r}=\mathrm{E}\{y^*(n)\boldsymbol{u}(n)\} \tag{5.5.10}$$

式 (5.5.8) 定义的滤波器称为 Wiener 滤波器。从均方误差最小的意义讲，Wiener 滤波器是最优的。

由于涉及数学期望，式 (5.5.6) 定义的最小化问题称为统计最优化 (stochastic optimization) 问题 [330],[284],[268]。在实际应用中，不可能获得信号 $\boldsymbol{u}(n)$ 的真实自相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 以及 $y(n)$ 与 $\boldsymbol{u}(n)$ 之间的真实互相关向量 $\boldsymbol{r}$。因此，实际的最优化问题通常取作

$$\min J_N(\boldsymbol{w})=\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}|y(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}(n)|^2 \tag{5.5.11}$$

由于不涉及数学期望运算，上述最优化问题称为确定性最优化 (deterministic optimization) 问题。确定性最优化问题式 (5.5.11) 可视为统计最优化问题式 (5.5.6) 的逼近，故也称统计逼近最优化问题。求解这个问题的方法称为统计逼近法 (stochastic approximation method)。

对一个固定的数据长度 N，求解统计逼近最优化问题式 (5.5.11) 的方法称为非递推型统计逼近法，是一种批处理方法。在自适应滤波和系统辨识中，数据长度 N 是动态增加的，希望对每一个时刻，求解统计逼近最优化问题式 (5.5.11)。这样一种方法称为递推型统计逼近法，是一种在线处理方法。

下降法是最简单的递推型统计逼近法，采用递推公式

$$\boldsymbol{w}(n)=\boldsymbol{w}(n-1)+\mu(n)\boldsymbol{p}(n) \tag{5.5.12}$$

即沿方向向量 $\boldsymbol{p}(n)$ 更新得到 n 时刻的滤波器权向量 $\boldsymbol{w}(n)$。通常选择代价函数的负共轭梯度 $-\nabla_{\boldsymbol{w}^*}J(\boldsymbol{w}(n-1))$ 作为方向向量 $\boldsymbol{p}(n)$。相应的算法为

$$\boldsymbol{w}(n)=\boldsymbol{w}(n-1)-\mu(n)\nabla_{\boldsymbol{w}^*}J(\boldsymbol{w}(n-1)) \tag{5.5.13}$$

称为梯度法或最陡下降法。

为了改善梯度法的性能，Newton 法使用矩阵 $\boldsymbol{Q}(n)$ 对共轭梯度向量进行加权，即

$$\boldsymbol{w}(n)=\boldsymbol{w}(n-1)-\mu(n)\boldsymbol{Q}(n)\nabla_{\boldsymbol{w}^*}J(\boldsymbol{w}(n-1)) \tag{5.5.14}$$

加权矩阵 $\boldsymbol{Q}(n)$ 最典型的选择为 Hessian 矩阵 (代价函数共轭梯度的梯度) $\nabla^2 J(\boldsymbol{w}(n-1))=\nabla_{\boldsymbol{w}^*\boldsymbol{w}}$ 的逆矩阵，即

$$\boldsymbol{w}(n)=\boldsymbol{w}(n-1)-\mu(n)\left[\nabla^2 J(\boldsymbol{w}(n-1))\right]^{-1}\nabla_{\boldsymbol{w}^*}J(\boldsymbol{w}(n-1)) \tag{5.5.15}$$

其目的是迫使校正方向 $\nabla J(\boldsymbol{w}(n-1))$ 指向代价函数的极小点。

如果 Hessian 矩阵 $\nabla^2 J(\boldsymbol{w}(n-1))$ 不是正定的或奇异时，可以通过加扰动项 (也叫松弛项) $\delta \boldsymbol{I}$ 使矩阵 $\nabla^2 J(\boldsymbol{w}(n-1)) + \delta \boldsymbol{I}$ 可逆，即递推算法变为

$$\boldsymbol{w}(n) = \boldsymbol{w}(n-1) - \mu(n)\left[\nabla^2 J(\boldsymbol{w}(n-1)) + \delta \boldsymbol{I}\right]^{-1} \nabla_{\boldsymbol{w}^*} J(\boldsymbol{w}(n-1)) \tag{5.5.16}$$

式中，$\delta > 0$ 是一个比较小的数。这一算法称为 Levenberg-Marguardt 算法。

当 Hessian 矩阵难于计算时，可以用另一个矩阵 $\boldsymbol{A}(n)$ 逼近 Hessian 矩阵，得到的递推算法为

$$\boldsymbol{w}(n) = \boldsymbol{w}(n-1) - \mu(n)\boldsymbol{A}^{-1}(n)\nabla_{\boldsymbol{w}^*} J(\boldsymbol{w}(n-1)) \tag{5.5.17}$$

这就是所谓的拟 Newton 法。

如上所述，最陡下降法、Newton 算法、Levenberg-Marguardt 算法和拟 Newton 算法需要已知目标函数的共轭梯度与 (或) Hessian 矩阵。

5.5.2 LMS 算法及其变型

将式 (5.5.7) 中的数学期望项用瞬时值代替，得到的梯度估计值称为瞬时梯度 (instantaneous gradient)，即有

$$\hat{\nabla} J(\boldsymbol{w}(n-1)) = -\boldsymbol{u}(n)\left[y^*(n) - \boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{w}(n-1)\right] = -e^*(n)\boldsymbol{u}(n) \tag{5.5.18}$$

式中

$$e(n) = y(n) - \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n) \tag{5.5.19}$$

称为先验估计误差，因为它是由 $n-1$ 时刻的滤波器权向量 $\boldsymbol{w}(n-1)$ 计算得到的误差。

将式 (5.5.13) 中的真实梯度用瞬时梯度代替后，即可将最陡下降法写作

$$\boldsymbol{w}(n) = \boldsymbol{w}(n-1) + \mu(n)e^*(n)\boldsymbol{u}(n) \tag{5.5.20}$$

这就是著名的最小均方 (least mean-squares) 自适应算法，简称 LMS 算法。式中，$\mu(n)$ 称为 LMS 算法的步长 (step size) 或学习速率 (learning rate)。当 $\mu(n) = \mu$ 取常数时，式 (5.5.20) 给出基本 LMS 算法，它是 Widrow 与 Hoff 于 1960 年提出的 [475]。

容易验证，瞬时梯度向量是真实梯度向量的无偏估计，即有

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\{\hat{\nabla} J(\boldsymbol{n}-\mathbf{1})\} &= -\mathrm{E}\{\boldsymbol{u}(n)[y^*(n) - \boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{w}(n-1)]\} \\
&= -[\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}\boldsymbol{w}(n-1)] \\
&= \nabla J(\boldsymbol{w}(n-1))
\end{aligned} \tag{5.5.21}$$

瞬时梯度的这一无偏性揭示了 LMS 算法与最陡下降法之间的区别与联系：

(1) 最陡下降法使用真实梯度的负方向作为搜索方向。因此，算法的每一步更新都是目标函数 (均方误差) 减小的方向。

(2) LMS 算法使用瞬时梯度作为搜索方向，因此不能保证每一步更新都是目标函数减小的方向。但是，由于瞬时梯度的数学期望等于真实梯度，所以 LMS 算法总的更新趋势是使目标函数极小化。

既然 LMS 算法不能保证每一步更新都使均方误差函数减小，那么自然希望 LMS 算法中各个时刻的瞬时梯度向量应该彼此线性无关。否则，一旦在某步迭代中出现均方误差增加的情况，瞬时梯度之间的线性相关性就有可能使得均方误差增加的情况得不到及时纠正，甚至愈演愈烈。

另一方面，由于瞬时梯度由 $-e^*(n)\boldsymbol{u}(n)$ 给出，所以瞬时梯度向量的线性无关性要求可以等价叙述为：不同时刻的滤波器输入信号向量 $\boldsymbol{u}(n)$ 线性无关。这就是 LMS 自适应算法对输入信号向量的线性无关性要求。

下面讨论 LMS 算法的实现与改进。

1. 学习速率的选择

LMS 算法中的步长参数 μ 决定滤波器权向量在每步迭代中的更新量大小，是影响算法收敛速率和跟踪性能的关键参数。由于 LMS 算法的目的是在更新过程中使滤波器权向量逼近 Wiener 滤波器，所以权向量的更新过程可以视为一种学习过程，而 μ 决定 LMS 算法学习过程的快慢。从这个意义上讲，步长参数 μ 也称学习速率参数。

基本 LMS 算法的收敛可分为均值收敛与均方收敛两种 [207]。

(1) 若 LMS 算法更新的权向量的均值收敛为 Wiener 滤波器，即

$$\lim_{n\to\infty} \mathrm{E}\{\boldsymbol{w}(n)\} = \boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}} \tag{5.5.22}$$

则称 LMS 算法是均值收敛的。此时，学习速率的选择必须满足条件 [207],[524]

$$0 < \mu < \frac{2}{\lambda_{\max}} \tag{5.5.23}$$

式中，$\lambda_{\max}$ 是滤波器输入的自相关矩阵 $\boldsymbol{R} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{u}(n)\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\}$ 的最大特征值。

(2) LMS 算法称为均方收敛，若当迭代次数 n 趋于无穷大时，误差信号 $\epsilon(n) = y(n) - \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{u}(n)$ 的均方值收敛为一常数，即

$$\lim_{n\to\infty} \mathrm{E}\left\{|\epsilon(n)|^2\right\} = c \tag{5.5.24}$$

式中，c 为一正的常数。此时，学习速率必须满足条件 [207]

$$0 < \mu < \frac{2}{\mathrm{tr}(\boldsymbol{R})} \tag{5.5.25}$$

式中，$\mathrm{tr}(\boldsymbol{R})$ 是自相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的迹。

2. LMS 算法的改进

考虑下面的约束最优化问题 [185]

$$\min_{\boldsymbol{w}(n)} \|\boldsymbol{w}(n) - \boldsymbol{w}(n-1)\|_2^2 \tag{5.5.26}$$

约束条件为

$$\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{u}(n) = d(n) \tag{5.5.27}$$

使用 Lagrange 乘数法求解，令 λ 为 Lagrange 乘数，目标函数为

$$J(\boldsymbol{w}) = \|\boldsymbol{w}(n) - \boldsymbol{w}(n-1)\|_2^2 + \lambda[\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}(n) - d(n)] \tag{5.5.28}$$

由

$$\begin{aligned}\frac{\partial J(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*(n)} &= \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^*(n)}\left\{[\boldsymbol{w}(n) - \boldsymbol{w}(n-1)]^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{w}(n) - \boldsymbol{w}(n-1)] + \lambda[\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{u}(n) - d(n)]\right\}\\ &= \boldsymbol{w}(n) - \boldsymbol{w}(n-1) + \lambda\boldsymbol{u}(n) = \boldsymbol{0}\end{aligned}$$

得

$$\boldsymbol{w}(n) = \boldsymbol{w}(n-1) - \lambda\boldsymbol{u}(n) \tag{5.5.29}$$

将式 (5.5.29) 代入约束条件 (5.5.27)，立即有 $[\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n-1) - \lambda^*\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)]\boldsymbol{u}(n) = d(n)$，从而得 Lagrange 乘数

$$\lambda = -\frac{\boldsymbol{e}^*(n)}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{u}(n)}$$

将此 Lagrange 乘数代入式 (5.5.29) 后，立即得到 LMS 算法的改进形式为

$$\boldsymbol{w}(n) = \boldsymbol{w}(n-1) + \mu e^*(n)\frac{\boldsymbol{u}(n)}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{u}(n)} \tag{5.5.30}$$

由于 $\dfrac{\boldsymbol{u}(n)}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{u}(n)}$ 是范数为 1 的向量，故算法 (5.5.30) 称为归一化 LMS 算法，简称 NLMS 算法，是 Goodwin 和 Sin [185] 得到的。

一种数值稳定性比 NLMS 算法更高的改进算法是功率归一化 LMS 算法，其学习速率为 [207]

$$\mu(n) = \frac{\alpha}{\beta + \boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{u}(n)}, \quad \alpha \in (0,2), \beta \geqslant 0 \tag{5.5.31}$$

式中，α 是一个松弛参数，取 $\beta > 0$ 可以保证上式分母不等于零。

功率归一化 LMS 算法的一种变型为 [282],[185],[423]

$$\mu(n) = \frac{\alpha}{\sigma_u^2(n)} \tag{5.5.32}$$

式中，$0 < \alpha < \dfrac{2}{M}$ (M 是滤波器的阶数)，σ_u^2 表示滤波器输入信号 $u(n)$ 的方差，可由

$$\sigma_u^2(n) = \lambda\sigma_u^2(n-1) + e^2(n) \tag{5.5.33}$$

递推计算，这里 $\lambda \in (0,1]$ 为遗忘因子。

5.5.3 解相关 LMS 算法

如前所述，在 LMS 算法中，要求不同时刻 n 的零均值输入信号向量 $\boldsymbol{u}(n)$ 线性无关。如果这一条件不满足，基本 LMS 算法的性能将明显下降，即收敛速度变慢，且跟踪性能变差。因此，在这种情况下，就需要解除各时刻输入信号向量之间的相关性 (这一过程称

为“解相关”)，使它们尽可能保持统计不相关。大量的研究表明 (文献 [175] 及其中有关参考文献)，解相关能够有效地加快 LMS 算法的收敛速率。

1. 时域解相关 LMS 算法

定义 $\boldsymbol{u}(n)=[u(n),u(n-1),\cdots,u(n-M+1)]^{\mathrm{T}}$ 与 $\boldsymbol{u}(n-1)=[u(n-1),u(n-2),\cdots,u(n-M)]^{\mathrm{T}}$ 在 n 时刻的相关系数为

$$a(n)\overset{\text{def}}{=}\frac{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n)}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n-1)} \tag{5.5.34}$$

显然，$a(n)\boldsymbol{u}(n-1)$ 代表了 $\boldsymbol{u}(n)$ 中与 $\boldsymbol{u}(n-1)$ 相关的部分。若从 $\boldsymbol{u}(n)$ 中减去该部分，则这一减法运算相当于“解相关”。现在，用解相关的结果作为更新方向向量 $\boldsymbol{p}(n)$，即

$$\boldsymbol{p}(n)=\boldsymbol{u}(n)-a(n)\boldsymbol{u}(n-1) \tag{5.5.35}$$

另一方面，步长参数 $\mu(n)$ 应该是满足下列最小化问题的解：

$$\mu(n)=\arg\min_{\mu} J[\boldsymbol{w}(n-1)+\mu\boldsymbol{p}(n)] \tag{5.5.36}$$

由此得

$$\mu(n)=\frac{e(n)}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{p}(n)} \tag{5.5.37}$$

综合以上结果，可以得到解相关 LMS 算法如下 [127]。

算法 5.5.1 (解相关 LMS 算法)

步骤 1 初始化

$\boldsymbol{w}(0)=\boldsymbol{0}$;

步骤 2 对 $n=1,2,\cdots$，计算

$$e(n)=y(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n)$$

$$a(n)=\frac{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n)}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n-1)}$$

$$\boldsymbol{p}(n)=\boldsymbol{u}(n)-a(n)\boldsymbol{u}(n-1)$$

$$\mu(n)=\frac{\rho e(n)}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{p}(n)}$$

$$\boldsymbol{w}(n)=\boldsymbol{w}(n-1)+\mu(n)\boldsymbol{p}(n)$$

上述算法中，参数 ρ 称为修整因子 (trimming factor)。

解相关 LMS 算法可视为一自适应辅助变量法，其中，辅助变量为方向向量 $\boldsymbol{p}(n)=\boldsymbol{u}(n)-a(n)\boldsymbol{u}(n-1)$。辅助变量的选择原则是：使得各时刻的方向向量正交。下面证明，前向预测器的误差向量就是这样一种辅助变量。

令 $\boldsymbol{a}(n)$ 为一个 M 阶前向预测器的权向量，其前向预测误差为

$$e^{\mathrm{f}}(n)=u(n)+\sum_{i=1}^{M}a_i(n)u(n-i)=u(n)+\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{u}(n-1) \tag{5.5.38}$$

式中

$$\boldsymbol{u}(n-1)=[u(n-1),u(n-2),\cdots,u(n-M)]^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{a}(n)=[a_1(n),a_2(n),\cdots,a_M(n)]^{\mathrm{T}}$$

式 (5.5.38) 表明，原来统计相关的滤波器输入信号 $u(n)$ 被拟合为一个自回归 (AR) 过程，其激励 $e^{\mathrm{f}}(n)$ 是统计不相关的。如果使用这种统计不相关的前向预测误差向量作辅助变量 (即更新方向向量)，便得到

$$\boldsymbol{p}(n)=\boldsymbol{e}^{\mathrm{f}}(n)=[e^{\mathrm{f}}(n),e^{\mathrm{f}}(n-1),\cdots,e^{\mathrm{f}}(n-M+1)]^{\mathrm{T}} \tag{5.5.39}$$

由于 $e^{\mathrm{f}}(n)$ 之间的统计不相关，使得方向向量满足正交性要求。

但是，由于瞬时估计误差 $e(n)=y(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n)$ 使用统计相关的输入信号向量 $\boldsymbol{u}(n)$ 得到，所以 $e(n)$ 也应该被变换成统计不相关的变量。最简单的方法就是使用前向预测器 $\boldsymbol{a}(n)$ 对 $e(n)$ 进行滤波。这样得到的自适应滤波算法称为滤波型 LMS 算法。

算法 5.5.2 (滤波型 LMS 算法) [306]

步骤 1　初始化

$\boldsymbol{w}(0)=\boldsymbol{0}$;

步骤 2　对 $n=1,2,\cdots$，给定一前向预测器 $\boldsymbol{a}(n)$ 的估计，计算

$$e(n)=y(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n)$$

$$\boldsymbol{e}(n)=[e(n),e(n-1),\cdots,e(n-M+1)]^{\mathrm{T}}$$

$$e^{\mathrm{f}}(n)=u(n)+\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}(n)\boldsymbol{u}(n-1)$$

$$\boldsymbol{e}^{\mathrm{f}}(n)=[e^{\mathrm{f}}(n),e^{\mathrm{f}}(n-1),\cdots,e^{\mathrm{f}}(n-M+1)]^{\mathrm{T}}$$

$$\tilde{e}(n)=e(n)+\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{e}(n)\qquad\text{(滤波)}$$

$$\boldsymbol{w}(n)=\boldsymbol{w}(n-1)+\mu\boldsymbol{e}^{\mathrm{f}}(n)\tilde{e}(n)$$

2. 变换域解相关 LMS 算法

改进 LMS 算法性能的早期工作是对输入数据向量 $\boldsymbol{u}(n)$ 使用酉变换。对某些类型的输入信号，使用酉变换的算法可以提高收敛速率，而计算复杂度却与 LMS 算法类似。这类算法以及它们的变型统称变换域自适应滤波算法 [125],[327],[276],[313],[418],[41]。

酉变换可以使用离散 Fourier 变换 (DFT)、离散余弦变换 (DCT) 和离散 Hartley 变换 (DHT)，它们都可以有效地提高 LMS 算法的收敛速率。

令 $\boldsymbol{S}$ 是一个 $M\times M$ 酉变换矩阵，即 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}=\beta\boldsymbol{I}$，式中，$\beta>0$ 为一固定标量。

用酉矩阵 $\boldsymbol{S}$ 对原输入数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 进行酉变换，得到

$$\boldsymbol{u}(n)=\boldsymbol{S}\boldsymbol{x}(n) \tag{5.5.40}$$

即变换后的输入数据向量变为 $\boldsymbol{u}(n)$。对应地，酉变换后的权向量 $\boldsymbol{w}(n-1)$ 变为

$$\hat{\boldsymbol{w}}(n-1)=\frac{1}{\beta}\boldsymbol{S}\boldsymbol{w}(n-1) \tag{5.5.41}$$

它就是我们需要更新估计的变换域自适应滤波器的权向量。

因此，原预测误差 $e(n)=y(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n)$ 可改用变换后的输入数据向量 $\boldsymbol{u}(n)$ 和滤波器权向量 $\hat{\boldsymbol{w}}(n-1)$ 表示，即

$$e(n)=y(n)-\hat{\boldsymbol{w}}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n) \tag{5.5.42}$$

将变换前的输入数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 和变换后的输入数据向量 $\boldsymbol{u}(n)$ 比较知，原数据向量的元素是 $x(n-i+1)$ 的移位形式，它们相关性强，而 $\boldsymbol{u}(n)=[u_1(n),u_2(n),\cdots,u_M(n)]^{\mathrm{T}}$ 的元素则相当于 M 信道的信号，可以期望，它们具有比原信号 $x(n)$ 更弱的相关性。换言之，通过酉变换，在变换域实现了某种程度的解相关。从滤波器的角度讲，原来的单信道 M 阶 FIR 横向滤波器变成了等价的多信道滤波器，而原输入信号 $\boldsymbol{u}(n)$ 则等价通过一含有 M 个滤波器的滤波器组。

总结以上分析，很容易得到变换域解相关 LMS 算法如下。

算法 5.5.3 (变换域解相关 LMS 算法)

步骤 1　初始化

$\hat{\boldsymbol{w}}(0)=\mathbf{0}$;

步骤 2　给定一酉变换矩阵 $\boldsymbol{S}$，对 $n=1,2,\cdots$，计算

$\boldsymbol{u}(n)=\boldsymbol{S}\boldsymbol{x}(n)$

$e(n)=y(n)-\hat{\boldsymbol{w}}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n)$

$\hat{\boldsymbol{w}}(n)=\hat{\boldsymbol{w}}(n-1)+\mu(n)\boldsymbol{u}(n)e(n)$

特别地，若酉变换采用 DFT，则变换后的输入数据向量 $\boldsymbol{u}(n)$ 是原输入数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 的滑动窗 Fourier 变换。这表明，被估计的权向量 $\hat{\boldsymbol{w}}(k)$ 是时域滤波器 $\boldsymbol{w}(n)$ 的频率响应。因此，可以说，自适应发生在频域，即此时的滤波为频域自适应滤波。

5.6　递推最小二乘算法

上节讨论了使用确定性最优化问题式 (5.5.11) 逼近统计最优化问题式 (5.5.6) 的梯度算法。与均匀加权的确定性最优化问题式 (5.5.11) 不同，本节考虑使用指数加权的确定性最优化问题：

$$\min J_n(\boldsymbol{w})=\sum_{i=0}^{n}\lambda^{n-i}|e(i)|^2=\sum_{i=0}^{n}\lambda^{n-i}\left|y(i)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{x}(i)\right|^2 \tag{5.6.1}$$

式中，$0<\lambda\leqslant 1$ 称为遗忘因子。指数加权的目标函数 $J_n(\boldsymbol{w})$ 的梯度为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{g}(n)=\frac{\partial J_n(\boldsymbol{w})}{\partial \boldsymbol{w}^*(n)}&=\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{w}^*(n)}\sum_{i=1}\lambda^{n-i}\left[y(i)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{x}(i)\right]\left[y(i)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{x}(i)\right]^*\\&=\boldsymbol{R}(n)\boldsymbol{w}(n)-\boldsymbol{r}(n)\end{aligned} \tag{5.6.2}$$

式中

$$\boldsymbol{R}(n)=\sum_{i=0}^{n}\lambda^{n-i}\boldsymbol{x}(i)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(i) \tag{5.6.3}$$

$$\boldsymbol{r}(n)=\sum_{i=0}^{n}\lambda^{n-i}\boldsymbol{x}(i)y^{*}(i) \tag{5.6.4}$$

根据 5.4 节介绍的无约束最优化问题的局部解的一阶必要条件知，无约束的指数加权确定性最优化问题式 (5.6.1) 的局部解由 $\boldsymbol{g}(n)=\mathbf{0}$ 给出。于是，由式 (5.6.2) 得

$$\boldsymbol{w}(n)=\boldsymbol{R}^{-1}(n)\boldsymbol{r}(n) \tag{5.6.5}$$

事实上，式 (5.6.5) 也可以从 Newton 算法公式 (5.5.15) 得到。由式 (5.5.7) 知

$$\nabla J(\boldsymbol{w}(n-1))=\boldsymbol{R}(n)\boldsymbol{w}(n-1)-\boldsymbol{r}(n),\qquad \nabla^{2}(\boldsymbol{w}(n-1))=\boldsymbol{R}(n)$$

因此，若在 Newton 算法公式 (5.5.15) 中取 $\mu(n)=1$，并将上述梯度和 Hessian 矩阵代入，则有

$$\boldsymbol{w}(n)=\boldsymbol{w}(n-1)-\boldsymbol{R}^{-1}(n)[\boldsymbol{R}(n)\boldsymbol{w}(n-1)-\boldsymbol{r}(n)]=\boldsymbol{R}^{-1}(n)\boldsymbol{r}(n) \tag{5.6.6}$$

这恰好就是式 (5.6.5)。

式 (5.6.5) 可以用时间递推的方式求解，得到的算法称为递推最小二乘 (recursive least squares，RLS) 自适应算法。由于式 (5.6.5) 与 Newton 算法公式 (5.5.15) 等价，所以 RLS 算法实际上是一种 Newton 算法。

考虑 $\boldsymbol{w}(n)$ 的时间递推。由自相关矩阵 $\boldsymbol{R}(n)$ 和互相关向量 $\boldsymbol{r}(n)$ 的定义易知

$$\boldsymbol{R}(n)=\lambda\boldsymbol{R}(n-1)+\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}} \tag{5.6.7}$$

$$\boldsymbol{r}(n)=\lambda\boldsymbol{r}(n-1)+\boldsymbol{x}(n)y^{*}(n) \tag{5.6.8}$$

对式 (5.6.7) 使用矩阵求逆引理，可得到逆矩阵 $\boldsymbol{P}(n)=\boldsymbol{R}^{-1}(n)$ 的递推公式为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}(n)&=\frac{1}{\lambda}\left[\boldsymbol{P}(n-1)-\frac{\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)}{\lambda+\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)}\right]\\&=\frac{1}{\lambda}\left[\boldsymbol{P}(n-1)-\boldsymbol{k}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\right]\end{aligned} \tag{5.6.9}$$

式中，$\boldsymbol{k}(n)$ 称为增益向量，定义为

$$\boldsymbol{k}(n)=\frac{\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)}{\lambda+\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{u}(x)} \tag{5.6.10}$$

利用式 (5.6.9) 不难证明

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}(n)\boldsymbol{x}(n)&=\frac{1}{\lambda}\left[\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)-\boldsymbol{k}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)\right]\\&=\frac{1}{\lambda}\left\{\left[\lambda+\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)\right]\boldsymbol{k}(n)-\boldsymbol{k}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)\right\}\\&=\boldsymbol{k}(n)\end{aligned} \tag{5.6.11}$$

另一方面，将式 (5.6.7) 和式 (5.6.8) 代入式 (5.6.5)，又有

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{w}(n) &= \boldsymbol{R}^{-1}(n)\boldsymbol{r}(n) = \boldsymbol{P}(n)\boldsymbol{r}(n) \\
&= \frac{1}{\lambda}\left[\boldsymbol{P}(n-1) - \boldsymbol{k}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\right]\left[\lambda \boldsymbol{r}(n-1) + y^*(n)\boldsymbol{x}(n)\right] \\
&= \boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{r}(n-1) + \frac{1}{\lambda}y^*(n)\left[\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{u}(n) - \boldsymbol{k}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)\right] - \\
&\quad \boldsymbol{k}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{r}(n-1)
\end{aligned}
$$

将式 (5.6.11) 代入上式，即可得到

$$
\boldsymbol{w}(n) = \boldsymbol{w}(n-1) + y^*(n)\boldsymbol{k}(n) - \boldsymbol{k}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{w}(n-1)
$$

经化简后，得

$$
\boldsymbol{w}(n) = \boldsymbol{w}(n-1) + \boldsymbol{k}(n)\epsilon^*(n) \tag{5.6.12}
$$

式中

$$
\epsilon(n) = y(n) - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(n)\boldsymbol{w}^*(n-1) = y(n) - \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{x}(n) \tag{5.6.13}
$$

称为先验估计误差。与之相区别，$e(n) = y(n) - \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{x}(n)$ 称为后验估计误差。

综上所述，得到 RLS 自适应算法如下。

算法 5.6.1 (RLS 自适应算法)

步骤 1　初始化

$\boldsymbol{w}(0) = \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{P}(0) = \delta^{-1}\boldsymbol{I}$，$\delta$ 是一个很小的值

步骤 2　对 $n = 1, 2, \cdots$，计算

$$
\begin{aligned}
\epsilon(n) &= d(n) - \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{x}(n) \\
\boldsymbol{k}(n) &= \frac{\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)}{\lambda + \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\boldsymbol{x}(n)} \\
\boldsymbol{P}(n) &= \frac{1}{\lambda}\left[\boldsymbol{P}(n-1) - \boldsymbol{k}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{P}(n-1)\right] \\
\boldsymbol{w}(n) &= \boldsymbol{w}(n-1) + \boldsymbol{k}(n)\epsilon^*(n)
\end{aligned}
$$

在 RLS 算法中，需要使用初始值 $\boldsymbol{P}(0) = \boldsymbol{R}^{-1}(0)$。在非平稳情况下，此初始值由下式决定：

$$
\boldsymbol{P}(0) = \boldsymbol{R}^{-1}(0) = \left[\sum_{i=-n_0}^{0} \lambda^{-i}\boldsymbol{x}(i)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(i)\right]^{-1} \tag{5.6.14}
$$

因此，自相关矩阵的表达式 (5.6.3) 变作

$$
\boldsymbol{R}(n) = \sum_{i=1}^{n} \lambda^{n-i}\boldsymbol{x}(i)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(i) + \boldsymbol{R}(0) \tag{5.6.15}
$$

由于 λ 的遗忘作用，自然希望 $\boldsymbol{R}(0)$ 在式 (5.6.14) 中起的作用很小。考虑到这一点，不妨用一个很小的单位矩阵来近似 $\boldsymbol{R}(0)$，即

$$
\boldsymbol{R}(0) = \delta\boldsymbol{I}, \quad \delta \text{ 是一很小的正数} \tag{5.6.16}
$$

因此，$\boldsymbol{P}(0)$ 的初始值由下式给出：

$$\boldsymbol{P}(0)=\delta^{-1}\boldsymbol{I},\quad \delta\text{ 是一很小的正数} \tag{5.6.17}$$

这就是为什么在算法 5.6.1 中初始值取 $\boldsymbol{P}(0)=\delta^{-1}\boldsymbol{I}$ (δ 很小) 的理由。

现在已经形成了一个广泛的共识：RLS 自适应算法的收敛速率和跟踪性能均优于 LMS 自适应算法，所付出的代价是需要更复杂的计算。此外，由于使用逆矩阵的递推，所以当滤波器的输入信号的自相关矩阵接近奇异时，RLS 算法的收敛速率和跟踪性能将严重恶化。

5.7 共轭梯度算法

在自适应滤波和系统辨识中，感兴趣的问题往往可以用一组线性方程组描述。事实上，线性方程组的求解不仅是自适应滤波和系统辨识中的重要问题，也是其他许多科学和技术领域里的一个核心问题。有趣的是，方程组的求解与适当构造的目标函数的最优化是两个等价的问题。

考查线性方程组

$$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b} \tag{5.7.1}$$

式中，$\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 维矩阵，并且非奇异。下面讨论两种情况。

1. 实数情况

目标函数取

$$J(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x} \tag{5.7.2}$$

根据实值函数极小化的条件知，目标函数关于向量 $\boldsymbol{x}$ 的梯度应该等于零，即 $\dfrac{\partial J(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}=\boldsymbol{0}$；并且 Hessian 矩阵 $\nabla^2 J(\boldsymbol{x})>0$。前一个条件的具体结果为 $\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}$，表明目标函数 $J(\boldsymbol{x})$ 的极小化与线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 具有相同的解。进一步求目标函数的梯度的梯度，得 Hessian 矩阵 $\nabla^2 J(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{A}$。因此，条件 $\nabla^2 J(\boldsymbol{x})>0$ 等价为矩阵 $\boldsymbol{A}>0$，即 $\boldsymbol{A}$ 必须是正定矩阵。又由于 Hessian 矩阵一定是对称矩阵，所以为了保证目标函数 $J(\boldsymbol{x})$ 的极小化与线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 具有相同的解，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 必须是对称的正定矩阵。

2. 复数情况

令目标函数

$$J(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} \tag{5.7.3}$$

根据实值函数极小化的条件知，目标函数关于向量 $\boldsymbol{x}_*$ 的梯度应该等于零，即 $\dfrac{\partial J(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}^*}=\boldsymbol{0}$；并且 Hessian 矩阵 $\nabla_{\boldsymbol{w}}[\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})]>0$。前一个条件的具体结果为 $\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}$，说明目标函数 $J(\boldsymbol{x})$ 的极小化与线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 具有相同的解。进一步求目标函数的共轭梯度的梯度，得 Hessian 矩阵 $\nabla_{\boldsymbol{w}}[\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})]=\boldsymbol{A}$。因此，条件 $\nabla_{\boldsymbol{w}}[\nabla_{\boldsymbol{w}^*}f(\boldsymbol{w})]>0$ 等价为 $\boldsymbol{A}>0$，即 Hessian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 必须是 Hermitian 正定矩阵。

上述讨论表明，在适当选择目标函数后，最优化问题的求解与线性方程组的求解完全等价，但要求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 必须是 (实或复共轭) 对称的正定矩阵。下面以复数情况为对象，讨论如何通过迭代运算求解线性方程组。

5.7.1 共轭方向算法

共轭方向算法是介于 LMS 算法和 RLS 算法之间的一类算法，其目的是希望既能够防止 LMS 算法的慢收敛速率，又能够避免 RLS 算法中对自相关矩阵的求逆运算。

记目标函数 $J(\boldsymbol{x})$ 的共轭梯度为 $\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \nabla_{\boldsymbol{x}^*} J(\boldsymbol{x})$，则

$$\boldsymbol{g}(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{r}(\boldsymbol{x}) \tag{5.7.4}$$

其涵义是：共轭梯度 $\boldsymbol{g}$ 与表示解向量 $\boldsymbol{x}$ 的残差向量 $\boldsymbol{r}$ 等价。这一重要结果在后面将多次用到。

由于以复向量为变元的标量函数总是使用其共轭梯度，所以常将共轭梯度简称为梯度。

定义 5.7.1[30] 称一个 Hermitian 正定矩阵 $\boldsymbol{B}$ 为内积矩阵 (inner product matrix)，若 $\langle \cdot, \cdot \rangle_B = \langle \cdot, \boldsymbol{B} \cdot \rangle$ 定义一内积，并称之为 $\boldsymbol{B}$ 内积。

很明显，若 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I}$，则 $\boldsymbol{B}$ 内积退化为向量内积。从这个角度讲，$\boldsymbol{B}$ 内积是向量内积的一种推广。例如

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \rangle_B = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{B}\boldsymbol{y} \rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{B} \boldsymbol{y}$$

定义 5.7.2[30] 给定一个 Hermitian 正定矩阵 $\boldsymbol{B}$，称非零向量组合 $\{\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_k\}$ 是相对于 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 相互共轭的 (也称 $\boldsymbol{B}$ 正交的)，若

$$\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}} \boldsymbol{B} \boldsymbol{p}_j = 0, \quad \forall i \neq j \tag{5.7.5}$$

式 (5.7.5) 描述的性质常常简称为一组向量的共轭性 (conjugacy)。显然，若 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I}$，则 $\boldsymbol{B}$ 正交退化为普通的向量正交。

根据线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是否为 Hermitian 矩阵，Hermitian 正定矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的选择有以下两种情况 [30]：

情况 1 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermitian 正定矩阵。此时，只要取 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}$ 即可，并且 $\boldsymbol{B}$ 内积 $\langle \cdot, \boldsymbol{B} \cdot \rangle = \langle \cdot, \boldsymbol{A} \cdot \rangle$。

情况 2 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，但不是 Hermitian 矩阵。此时，取 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A}$ 后，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 既是 Hermitian 的，也是正定的。注意，在这种情况下，$\boldsymbol{B}$ 内积为

$$\langle \cdot, \cdot \rangle_B = \langle \cdot, \boldsymbol{B} \cdot \rangle = \langle \cdot, \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A} \cdot \rangle = \langle \boldsymbol{A} \cdot, \boldsymbol{A} \cdot \rangle \tag{5.7.6}$$

例如

$$\langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{B}\boldsymbol{y} \rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{B} \boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A} \boldsymbol{y} = \langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{y} \rangle$$

对于所有非零向量 $\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y} \in C^n$ 成立。

由于 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，所以用非奇异的 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 左乘线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的两边，将不会对方程组的解产生任何影响，即线性方程组 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 具有完全相同的解。容易验证，目标函数 $J(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$ 的极小化与线性方程组 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$ 具有相同的解，并且 Hessian 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 是 Hermitian 正定的。在这种情况下，共轭梯度

$$\boldsymbol{g}'=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{g} \tag{5.7.7}$$

式中，$\boldsymbol{g}=\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}$ 是原线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的共轭梯度。

以上讨论可以总结为表 5.7.1 的对比结果。

表 5.7.1 不同情况下线性方程组 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的求解

矩阵 $\boldsymbol{A}$	Hermitian 正定矩阵	非奇异矩阵
目标函数	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}$
Hessian 矩阵 $\boldsymbol{B}$	$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}$	$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$
$\boldsymbol{B}$ 内积 $\langle\cdot,\cdot\rangle_{\boldsymbol{B}}$	$\langle\cdot,\boldsymbol{A}\cdot\rangle$	$\langle\boldsymbol{A}\cdot,\boldsymbol{A}\cdot\rangle$
梯度向量	$\boldsymbol{g}=\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}$	$\boldsymbol{g}'=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{g}$

下面以 Hermitian 正定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对象展开讨论，其有关最优化公式很容易推广到 $\boldsymbol{A}$ 非奇异的一般情况。这是因为，只要根据表 5.7.1，将 $\boldsymbol{A}$ 内积 $\langle\cdot,\boldsymbol{A}\cdot\rangle$ 修正为 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 内积 $\langle\boldsymbol{A}\cdot,\boldsymbol{A}\cdot\rangle$ 与 (或) 将梯度 $\boldsymbol{g}$ 替换为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{g}$，即可得到 $\boldsymbol{A}$ 非奇异情况下的有关优化公式。

命题 5.7.1 若 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermitian 正定矩阵，并且非零向量组 $\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_k$ 是相对于 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 共轭的向量，则这些共轭向量线性无关。

证明 假设存在常数 $\alpha_i,i=0,1,\cdots,k$，使得

$$\alpha_0\boldsymbol{p}_0+\alpha_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+\alpha_k\boldsymbol{p}_k=\boldsymbol{0}$$

上式两边左乘 $\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$，并利用共轭条件 $\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ap}_j=0,\forall i\neq j$，立即得

$$\alpha_i\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ap}_i=0,\quad \forall i=0,1,\cdots,k$$

但是，由于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 正定，即 $\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ap}_i>0,\forall\boldsymbol{p}_i\neq\boldsymbol{0}$，故上式给出结果 $\alpha_i=0,\forall i=0,1,\cdots,k$。因此，向量组 $\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_k$ 线性无关。 ■

给定 $n\times n$ 正定矩阵 $\boldsymbol{A}$，令 $\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_{n-1}$ 是 n 个 $\boldsymbol{A}$ 共轭的非零基向量。由命题 5.7.1 知，这些向量线性无关。因此，线性方程组 (5.7.1) 或者最优化问题式 (5.7.3) 的解 $\boldsymbol{x}_*$ 可以用这些正交基向量的线性组合

$$\boldsymbol{x}_*=\alpha_0\boldsymbol{p}_0+\alpha_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+\alpha_{n-1}\boldsymbol{p}_{n-1} \tag{5.7.8}$$

作级数展开。为了确定常数 α_i，用矩阵 $\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 左乘式 (5.7.8) 两边，易知

$$\alpha_i=\frac{\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}_*}{\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ap}_i}=\frac{\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}}{\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ap}_i},\quad i=0,1,\cdots,n-1 \tag{5.7.9}$$

将式 (5.7.9) 代入式 (5.7.8)，得到

$$x_* = \sum_{i=0}^{n-1} \frac{p_i^{\mathrm{H}} b}{p_i^{\mathrm{H}} A p_i} p_i \tag{5.7.10}$$

从线性方程组或者最优化问题的解的表达式 (5.7.10)，可以得到两个基本的观察：

(1) 选择一组相对于 A 共轭的向量 $p_0, p_1, \cdots, p_{n-1}$，用它们作为解向量 x_* 的级数展开的基函数，如式 (5.7.8) 所示。

(2) 式 (5.7.9) 表明，展开系数 α_i 可以直接根据已知的矩阵 A、向量 b 以及 A 共轭的向量组计算，而无需用到未知的向量 x。

这两个观察启示我们，线性方程组 (5.7.1) 或者最优化问题式 (5.7.3) 的解 x_* 是 n 步迭代过程的结果：在第 $k+1$ 步迭代，只要对前一步迭代得到的解 x_k 加上校正项 $\alpha_k p_k$，即可得到新的迭代结果 x_{k+1}，即

$$x_{k+1} = x_k + \alpha_k p_k \tag{5.7.11}$$

式中

$$\alpha_k = -\frac{p_k^{\mathrm{H}} g_k}{p_k^{\mathrm{H}} A p_k} = -\frac{\langle p_k, g_k\rangle}{\langle p_k, A p_k\rangle} \tag{5.7.12}$$

并且 g_k 是目标函数的梯度向量。注意到梯度向量与迭代解 x_k 对应的残差向量等价，故有

$$g_k = A x_k - b \tag{5.7.13}$$

式 (5.7.11) 和式 (5.7.12) 构成的迭代算法称为共轭方向算法 (conjugate direction algorithm)。其基本思想是：

(1) 向量 p_k 在迭代过程中起着更新或搜索方向的作用，同时由于 $p_0, p_1, \cdots, p_{n-1}$ 相对于矩阵 A 共轭，所以常称它们为共轭方向向量。

(2) 更新量的大小受 α_k 调节，而 α_k 主要取决于方向向量 p_k 与梯度向量 g_k 的内积 $p_k^{\mathrm{H}} g_k$。

因此，当共轭方向向量 $p_0, p_1, \cdots, p_{n-1}$ 预先选择之后，线性方程组的每一步迭代求解都是在预先选择好的 p_k 方向上更新，而更新的步长由梯度向量 g_k(等价为残差向量) 决定。因此，共轭方向向量 p_k 起着搜索线性方程组的真实解的作用，故又常被称为搜索方向 (search direction)。

如果矩阵 A 只是非奇异，而非 Hermitian 的，则根据表 5.7.1，只要将共轭方向算法中的公式 (5.7.12) 中的矩阵 A 换成 $A^{\mathrm{H}} A$，梯度向量 g_k 替换为 $A^{\mathrm{H}} g_k$ 即可，结果为

$$\alpha_k = -\frac{p_k^{\mathrm{H}} A^{\mathrm{H}} g_k}{p_k^{\mathrm{H}} A^{\mathrm{H}} A p_k} = -\frac{\langle A p_k, g_k\rangle}{\langle A p_k, A p_k\rangle} \tag{5.7.14}$$

下面两个定理刻画了共轭方向算法的性能。

定理 5.7.1 (共轭方向定理) [30]　令 $p_0, p_1, \cdots, p_{n-1}$ 是一组相对于 Hermitian 矩阵 A 共轭的非零向量，并且 x_0 为一任意初始向量。若使用共轭方向算法式 (5.7.11) 和式

(5.7.12) 迭代求解线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，则解序列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 在 n 步迭代后，收敛为线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的唯一解 $\boldsymbol{x}_*$，即 $\boldsymbol{x}_n=\boldsymbol{x}_*$。

证明 由命题 5.7.1 知，共轭方向 $\boldsymbol{p}_k$ 线性无关。因此，可以用它们作基向量，对 $\boldsymbol{x}_*-\boldsymbol{x}_0$ 进行展开：

$$\boldsymbol{x}_*-\boldsymbol{x}_0=\sigma_0\boldsymbol{p}_0+\sigma_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+\sigma_{n-1}\boldsymbol{p}_{n-1} \tag{5.7.15}$$

上式两边左乘 $\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$，并利用式 (5.7.5) 描述的共轭性，立即得到

$$\sigma_k=\frac{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_*-\boldsymbol{x}_k)}{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k} \tag{5.7.16}$$

下面证明 σ_k 与式 (5.7.12) 的常数 α_k 一致。

如果 $\boldsymbol{x}_k$ 利用式 (5.7.11) 迭代产生，则

$$\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{p}_0+\alpha_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+\alpha_{k-1}\boldsymbol{p}_{k-1} \tag{5.7.17}$$

上式左乘 $\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$，并利用向量组合 $\{\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_k\}$ 的共轭性，立即有

$$\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_0)=0$$

利用上式和 $\boldsymbol{x}_*-\boldsymbol{x}_0=(\boldsymbol{x}_*-\boldsymbol{x}_k)+(\boldsymbol{x}_k-\boldsymbol{x}_0)$，易得

$$\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_*-\boldsymbol{x}_0)=\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}_*-\boldsymbol{x}_k)=\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k)=-\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{r}_k$$

将这一结果代入式 (5.7.16)，即得

$$\sigma_k=-\frac{\boldsymbol{p}_k^{H}\boldsymbol{r}_k}{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k}=\alpha_k$$

再将 $\sigma_k=\alpha_k$ 代入式 (5.7.15)，则有

$$\boldsymbol{x}_*=\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{p}_1+\alpha_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+\alpha_{n-1}\boldsymbol{p}_{n-1}$$

在式 (5.7.17) 中令 $k=n$，又得

$$\boldsymbol{x}_n=\boldsymbol{x}_0+\alpha_0\boldsymbol{p}_1+\alpha_1\boldsymbol{p}_1+\cdots+\alpha_{n-1}\boldsymbol{p}_{n-1}$$

比较以上两式，立即知 $\boldsymbol{x}_n=\boldsymbol{x}_*$，定理得证。 ■

定理 5.7.2 (扩展子空间定理) [30] 令 $\boldsymbol{x}_0\in C^{n\times 1}$ 是一个任意选择的初始点，且 $\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_{n-1}$ 为非零的 $\boldsymbol{A}$ 共轭向量。若解序列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 由共轭方向算法式 (5.7.11) 和式 (5.7.12) 产生，则 $\boldsymbol{x}_k$ 在直线 $\boldsymbol{x}_{k-1}+\alpha\boldsymbol{p}_{k-1}$ 以及在直线族 $\boldsymbol{x}_0+\mathrm{Span}\{\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_{k-1}\}$ 方向上使函数 $f(\boldsymbol{x})=\frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 最小化。

证明 由于直线族 $\boldsymbol{x}_0+\mathrm{Span}\{\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_{k-1}\}$ 包含了直线 $\boldsymbol{x}_{k-1}+\alpha\boldsymbol{p}_{k-1}$ 在内，所以只需要证明 $\boldsymbol{x}_k$ 在直线族 $\boldsymbol{x}_0+\mathrm{Span}\{\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_{k-1}\}$ 方向上使函数 $f(\boldsymbol{x})$ 最小化即可。由于函数 $f(\boldsymbol{x})$ 是严格凸函数，所以如果能够证明函数 $f(\boldsymbol{x})$ 在 $\boldsymbol{x}_k$ 的梯度 $\boldsymbol{g}_k$ 与子空间 $\mathcal{B}_k=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_{k-1}\}$ 正交，即 $\boldsymbol{g}_k\perp\mathcal{B}_k$，则 $\boldsymbol{x}_k$ 将使 $f(\boldsymbol{x})$ 最小化。

下面用数学归纳法证明 $\boldsymbol{g}_k \perp \mathcal{B}_k$。由于子空间 $\mathcal{B}_0$ 是空的，所以 $\boldsymbol{g}_0 \perp \mathcal{B}_0$。假设 $\boldsymbol{g}_k \perp \mathcal{B}_k$，现在证明 $\boldsymbol{g}_{k+1} \perp \mathcal{B}_{k+1}$。在

$$\boldsymbol{g}_{k+1} = \boldsymbol{g}_k + \alpha_k \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k$$

两边左乘 $\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}$，并利用 α_k 的定义式 (5.7.12)，立即得

$$\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}_{k+1} = \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k = 0 \tag{5.7.18}$$

另一方面

$$\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}_{k+1} = \boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k = 0, \quad i < k \tag{5.7.19}$$

由归纳法假设 $\boldsymbol{g}_k \perp \mathrm{Span}\{\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_{k-1}\}$ 知 $\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g} = 0, \forall i < k$，即式 (5.7.19) 右边第一项等于零。根据方向向量 $\boldsymbol{p}_i$ 的 $\boldsymbol{A}$ 共轭性假设，立即知 $\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k = 0, i < k$，即式 (5.7.19) 右边的第二项也等于零。于是，式 (5.7.19) 的结果为 $\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}_{k+1} = 0, i < k$。这一结果连同式 (5.7.18) 一起，可以合写为

$$\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}_{k+1} = 0, \quad i = 0, 1, \cdots, k \tag{5.7.20}$$

这意味着 $\boldsymbol{g}_{k+1} \perp \mathrm{Span}\{\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_k\}$。这就用归纳法完成了本定理的证明。 ■

推论 5.7.1 在共轭方向法中，梯度 $\boldsymbol{g}_k, k = 0, 1, \cdots, n$ 满足正交关系

$$\boldsymbol{g}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_i = 0, \quad \forall i < k \tag{5.7.21}$$

扩展子空间的涵义是：由方向向量张成的子空间序列 $\mathcal{B}_k \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{Span}\{\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_{k-1}\}$ 满足关系式 $\mathcal{B}_{k+1} \supset \mathcal{B}_k$。

至此，在利用共轭方向法求解线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 时，还剩余一个问题有待解决：如何构造相对于 Hermitian 正定矩阵 $\boldsymbol{B}$ 共轭的搜索向量 $\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_{n-1}$?

一个简单的事实是，Hermitian 正定矩阵 $\boldsymbol{B} \in C^{n\times n}$ 的特征向量 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n$ 构成了一组搜索共轭向量，因为

$$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_j = \lambda_i \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_j = 0, \quad \forall i \neq j \tag{5.7.22}$$

但是，这种构造方法必须先对 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 进行特征值分解，需要较多的运算。

构造共轭搜索向量更实际的方法是 Gram-Schmidt 正交化方法。

假定任意一个非零的初始解 $\boldsymbol{x}_0$，计算初始梯度或初始残差 $\boldsymbol{g}_0 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_0 - \boldsymbol{b}$，则以下递推 [30] 可以产生 $\boldsymbol{B}$ 正交 (即 $\boldsymbol{B}$ 共轭) 的向量组

$$\boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{g}_0 \tag{5.7.23}$$

$$\cdots$$

$$\boldsymbol{p}_{j+1} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_j - \sum_{i=0}^{j} \sigma_{i,j}\boldsymbol{p}_i \tag{5.7.24}$$

式中

$$\sigma_{i,j} = \frac{\langle \boldsymbol{B}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_j, \boldsymbol{p}_i \rangle}{\langle \boldsymbol{B}\boldsymbol{p}_i, \boldsymbol{p}_i \rangle} \tag{5.7.25}$$

5.7.2 共轭梯度算法

凡使用共轭方向向量作为更新方向的算法统称为共轭方向算法。若共轭方向向量 $\boldsymbol{p}_0, \boldsymbol{p}_1, \cdots, \boldsymbol{p}_{n-1}$ 不是预先设定的，而是在迭代过程中加以更新，则可以得到共轭方向算法的各种变型。如果共轭方向向量利用梯度下降法更新，便得到共轭梯度算法。具体而言，在共轭梯度算法中，共轭方向向量的更新公式为

$$\boldsymbol{p}_k = -\boldsymbol{g}_k + \beta_k \boldsymbol{p}_{k-1} \tag{5.7.26}$$

式中，$-\boldsymbol{g}_k$ 表示梯度的负方向，因此是一种梯度下降算法。上式两边左乘 $\boldsymbol{p}_{k-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$，并利用共轭方向向量的共轭性 $\boldsymbol{p}_{k-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k = 0$，立即得到

$$\beta_k = \frac{\boldsymbol{p}_{k-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_k}{\boldsymbol{p}_{k-1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_{k-1}} = \frac{\langle \boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_k\rangle}{\langle \boldsymbol{p}_{k-1}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_{k-1}\rangle} \tag{5.7.27}$$

综合式 (5.7.11) ~ 式 (5.7.12) 和式 (5.7.26)~ 式 (5.7.27)，便得到求解线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的共轭梯度算法如下。

算法 5.7.1 (原始共轭梯度算法)[337]

步骤 1 初始化

$\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{0}$，$\boldsymbol{g}_0 = -\boldsymbol{b}$，$\boldsymbol{p}_0 = -\boldsymbol{g}_0$

步骤 2 对 $k = 0, 1, \cdots, k_{\max}$，计算

$$\alpha_k = -\frac{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{g}_k}{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k} = -\frac{\langle \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{g}_k\rangle}{\langle \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k\rangle} \tag{5.7.28}$$

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k \tag{5.7.29}$$

$$\boldsymbol{g}_{k+1} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{b} \tag{5.7.30}$$

$$\beta_{k+1} = \frac{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_{k+1}}{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k} = \frac{\langle \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_{k+1}\rangle}{\langle \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k\rangle} \tag{5.7.31}$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = -\boldsymbol{g}_{k+1} + \beta_{k+1}\boldsymbol{p}_k \tag{5.7.32}$$

若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不是 Hermitian 矩阵，则根据表 5.7.1 的对应关系，需要将式 (5.7.28) 中的 $\boldsymbol{A}$ 内积 $\langle \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k\rangle$ 替换为 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 内积 $\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k\rangle$，并且将分子中的梯度 $\boldsymbol{g}_k$ 替换为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{g}_k$，即有

$$\alpha_k = -\frac{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{g}_k}{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k} = -\frac{\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{g}_k\rangle}{\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k\rangle} \tag{5.7.33}$$

而对于 β_{k+1}，则需要将式 (5.7.31) 的分子中的 $\boldsymbol{A}$ 内积 $\langle \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_{k+1}\rangle$ 替换为 $\boldsymbol{B}$ 内积 $\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_{k+1}\rangle$；同时，将分母的 $\boldsymbol{A}$ 内积 $\langle \boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k\rangle$ 也替换为 $\boldsymbol{B}$ 内积 $\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k\rangle$。就是说，$\beta_{k+1}$ 应该修正为

$$\beta_{k+1} = \frac{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_{k+1}}{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k} = \frac{\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_{k+1}\rangle}{\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k\rangle} \tag{5.7.34}$$

定义 5.7.3 (Krylov 子空间) 令 $\boldsymbol{A}$ 是 $n\times n$ 矩阵，且 $\boldsymbol{r}_0$ 是一个 $n\times 1$ 向量，称

$$K(\boldsymbol{r}_0;k)\stackrel{\text{def}}{=}\text{Span}\{\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{A}\boldsymbol{r}_0,\cdots,\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{r}_0\} \tag{5.7.35}$$

是向量 $\boldsymbol{r}_0$ 的 k 阶或者 k 维 Krylov 子空间。

定理 5.7.3[337, p.108] 假设由共轭梯度算法在第 k 步迭代产生的解 $\boldsymbol{x}_k$ 不是线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的解 $\boldsymbol{x}_*$，则下列四个性质成立：

$$\boldsymbol{g}_k^{\text{H}}\boldsymbol{g}_i=0,\qquad i=0,1,\cdots,k-1 \tag{5.7.36}$$

$$\text{Span}\{\boldsymbol{g}_0,\boldsymbol{g}_1,\cdots,\boldsymbol{g}_k\}=\text{Span}\{\boldsymbol{g}_0,\boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_0,\cdots,\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{g}_0\} \tag{5.7.37}$$

$$\text{Span}\{\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_k\}=\text{Span}\{\boldsymbol{g}_0,\boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_0,\cdots,\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{g}_0\} \tag{5.7.38}$$

$$\boldsymbol{p}_k^{\text{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_i=0,\qquad i=0,1,\cdots,k-1 \tag{5.7.39}$$

因此，序列 $\{\boldsymbol{x}_k\}$ 最多只需要 n 步迭代，即可收敛为 $\boldsymbol{x}_*$。

证明 见文献 [337, pp.108~110]。

需要注意的是，在定理 5.7.3 的证明中，有一个基本的假设：第一个搜索方向 $\boldsymbol{p}_0$ 选择为最陡下降方向 $-\boldsymbol{g}_0$。对于 $\boldsymbol{p}_0$ 的其他选择，定理 5.7.3 的结果将不成立。

共轭梯度算法具有的重要性质可以归纳如下[79]：

(1) 方向向量 $\boldsymbol{p}_0,\boldsymbol{p}_1,\cdots,\boldsymbol{p}_k$ 的 $\boldsymbol{A}$ 正交性或相对于 $\boldsymbol{A}$ 的共轭性[184],[292],[23],[337]，即

$$\boldsymbol{p}_i^{\text{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k=0,\quad \forall i\neq k \tag{5.7.40}$$

(2) 梯度 (或残差) 向量的正交性[184],[23],[337]，即

$$\boldsymbol{g}_k^{\text{H}}\boldsymbol{g}_i=0,\quad i=0,1,\cdots,k-1 \tag{5.7.41}$$

(3) 梯度 (或残差) 向量 $\boldsymbol{g}_k, k=0,1,\cdots,k_{\max}$ 服从扩展子空间定理[292],[337]，即第 k 步迭代的残差向量与本步及前面各步的方向向量正交：

$$\boldsymbol{g}_k^{\text{H}}\boldsymbol{p}_i=0,\quad i<k \tag{5.7.42}$$

(4) 有限步结束迭代性 (finite termination property)[217],[292],[23],[337]，即

$$k_{\max}\leqslant n \tag{5.7.43}$$

(5) 下降性，即

$$\boldsymbol{p}_{k+1}^{\text{H}}\boldsymbol{g}_{k+1}\leqslant 0 \tag{5.7.44}$$

为了看出共轭梯度算法的下降性，由式 (5.7.32) 易知

$$\boldsymbol{p}_{k+1}^{\text{H}}\boldsymbol{g}_{k+1}=-\boldsymbol{g}_{k+1}^{\text{H}}\boldsymbol{g}_{k+1}+\beta_{k+1}\boldsymbol{p}_k^{\text{H}}\boldsymbol{g}_{k+1}=-\boldsymbol{g}_{k+1}^{\text{H}}\boldsymbol{g}_{k+1}$$

式中，利用了 $\boldsymbol{p}_k^{\text{H}}\boldsymbol{g}_{k+1}=0$ (扩展子空间定理)。由于内积 $\boldsymbol{g}_{k+1}^{\text{H}}\boldsymbol{g}_{k+1}\geqslant 0$，故 $\boldsymbol{p}_{k+1}^{\text{H}}\boldsymbol{g}_{k+1}\leqslant 0$。

这意味着第 $k+1$ 步迭代的搜索方向 $\boldsymbol{p}_{k+1}$ 总是取梯度向量 $\boldsymbol{g}_{k+1}$ 的负方向 (此即下降性的涵义)。

注意，由于梯度向量 $\boldsymbol{g}_k$ 只是相互正交，它们并不是相对于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 共轭的，而真正相对于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 共轭的是搜索方向 $\boldsymbol{p}_k$，所以"共轭梯度法"实际上是一种误称 [337, p.110]。

原始共轭梯度算法计算三次矩阵与向量的乘积 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k$ 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{g}_{k+1}$，需要较多的计算量。下面的算法只需要计算矩阵与向量的乘积 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k$，是一种经济的共轭梯度算法，被认为是标准的共轭梯度算法。

算法 5.7.2 (标准共轭梯度算法)[184],[292],[79]

步骤 1 初始化

$\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{0}$，$\boldsymbol{g}_0=\boldsymbol{b}, \boldsymbol{p}_1=\boldsymbol{g}_0$，$\rho_0=\boldsymbol{g}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{g}_0$

步骤 2 对 $k=0,1,\cdots,k_{\max}$，计算

$$\boldsymbol{v}_k=\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k \tag{5.7.45}$$

$$\alpha_k=\frac{\rho_{k-1}}{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v}_k} \tag{5.7.46}$$

$$\boldsymbol{x}_k=\boldsymbol{x}_{k-1}+\alpha_k\boldsymbol{p}_k \tag{5.7.47}$$

$$\boldsymbol{g}_k=\boldsymbol{g}_{k-1}-\alpha_k\boldsymbol{v}_k \tag{5.7.48}$$

$$\rho_k=\boldsymbol{g}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{g}_k \tag{5.7.49}$$

$$\beta_k=\rho_k/\rho_{k-1} \tag{5.7.50}$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1}=-\boldsymbol{g}_k+\beta_k\boldsymbol{p}_k \tag{5.7.51}$$

当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不是实对称矩阵时，可以使用 Fletcher [156] 提出的双共轭梯度法 (biconjugate gradient method) 求解矩阵方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$。顾名思义，在这种方法中，有两个搜索方向 $\boldsymbol{p},\bar{\boldsymbol{p}}$ 与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 共轭：

$$\left.\begin{aligned}\bar{\boldsymbol{p}}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_j=\boldsymbol{p}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{p}}_j=0, &\quad i\neq j\\ \bar{\boldsymbol{r}}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_j=\boldsymbol{r}_i^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{r}}_j^{\mathrm{T}}=0, &\quad i\neq j\\ \bar{\boldsymbol{r}}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_j=\boldsymbol{r}_i^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{p}}_j^{\mathrm{T}}=0, &\quad j<i\end{aligned}\right\} \tag{5.7.52}$$

算法 5.7.3 (双共轭梯度法) [156],[238]

步骤 1 初始化

$\boldsymbol{p}_1=\boldsymbol{r}_1$，$\bar{\boldsymbol{p}}_1=\bar{\boldsymbol{r}}_1$

步骤 2 对 $k=0,1,\cdots,k_{\max}$，计算

$$\alpha_k=\bar{\boldsymbol{r}}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_k/(\bar{\boldsymbol{p}}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k) \tag{5.7.53}$$

$$\boldsymbol{r}_{k+1}=\boldsymbol{r}_k-\alpha_k\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k \tag{5.7.54}$$

$$\bar{\boldsymbol{r}}_{k+1}=\bar{\boldsymbol{r}}_k-\alpha_k\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{p}}_k \tag{5.7.55}$$

$$\beta_k=\bar{\boldsymbol{r}}_{k+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_{k+1}/(\bar{\boldsymbol{r}}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_k) \tag{5.7.56}$$

$$\boldsymbol{p}_{k+1}=\boldsymbol{r}_{k+1}+\beta_k\boldsymbol{p}_k \tag{5.7.57}$$

$$\bar{\boldsymbol{p}}_{k+1}=\bar{\boldsymbol{r}}_{k+1}+\beta_k\bar{\boldsymbol{p}}_k \tag{5.7.58}$$

输出

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k \boldsymbol{p}_k \tag{5.7.59}$$

$$\bar{\boldsymbol{x}}_{k+1} = \bar{\boldsymbol{x}}_k + \alpha_k \bar{\boldsymbol{p}}_k \tag{5.7.60}$$

5.7.3 自适应滤波的共轭梯度算法

应当强调指出，以上讨论的共轭梯度算法是针对 n 个样本的数据块设计的，属块处理算法。在自适应信号处理中，希望当数据逐个更新时，共轭梯度算法能够自适应更新线性方程组的解。例如，Wiener 滤波器的矩阵方程为

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{r} \tag{5.7.61}$$

式中，$\boldsymbol{R} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(n)\}$ 为滤波器输入数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 的自相关矩阵，而 $\boldsymbol{r} = \mathrm{E}\{d(n)\boldsymbol{x}(n)\}$ 是输入数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 与滤波器标量期望输出 $d(n)$ 之间的互相关向量。

假定输入数据和期望输出均为实数据，且滤波器 $\boldsymbol{w} = [w_1, w_2, \cdots, w_m]^{\mathrm{T}}$ 的抽头都是实系数。取目标函数

$$J(\boldsymbol{w}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}\boldsymbol{w} - \boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r} \tag{5.7.62}$$

则自相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 符合共轭梯度法对矩阵的对称正定性的要求。

定义 n 时刻的样本自相关矩阵和样本互相关向量分别为

$$\boldsymbol{R}(n) = \frac{1}{m}\sum_{i=n-m+1}^{n} \lambda^{n-i}\boldsymbol{x}(i)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(i) \tag{5.7.63}$$

$$\boldsymbol{r}(n) = \frac{1}{m}\sum_{i=n-m+1}^{n} \lambda^{n-i}d(i)\boldsymbol{x}(i) \tag{5.7.64}$$

式中，$0 < \lambda \leqslant 1$ 为遗忘因子。于是，样本自相关矩阵和样本互相关向量可以递推计算：

$$\boldsymbol{R}(n) = \lambda\boldsymbol{R}(n-1) + \boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(n) \tag{5.7.65}$$

$$\boldsymbol{r}(n) = \lambda\boldsymbol{r}(n-1) + d(n)\boldsymbol{x}(n) \tag{5.7.66}$$

负梯度向量 $\boldsymbol{g}(n) = -[\boldsymbol{R}(n)\boldsymbol{w}(n) - \boldsymbol{r}(n)]$ 也可递推如下：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{g}(n) &= \boldsymbol{r}(n) - \boldsymbol{R}(n)\boldsymbol{w}(n)\\ &= \lambda\boldsymbol{g}(n-1) - \alpha(n)\boldsymbol{R}(n)\boldsymbol{p}(n) + \boldsymbol{x}(n)[d(n) - \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(n)\boldsymbol{w}(n-1)]\end{aligned} \tag{5.7.67}$$

针对上述自适应滤波问题，Chang 与 Willson[79] 提出了以下两种修正共轭梯度算法。

算法 5.7.4 (自适应共轭梯度算法 1 (CG1)) [79]

步骤 1　初始化

$$\boldsymbol{w}(0) = \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{g}(0) = \boldsymbol{r}(0),\ \boldsymbol{p}(1) = \boldsymbol{g}(0),\ \boldsymbol{R}(0) = \boldsymbol{O},\ \boldsymbol{r}(0) = \boldsymbol{0}$$

步骤 2 对 $n=1,2,\cdots$，计算

$$\boldsymbol{R}(n)=\lambda\boldsymbol{R}(n-1)+\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(n) \tag{5.7.68}$$

$$\boldsymbol{r}(n)=\lambda\boldsymbol{r}(n-1)+d(n)\boldsymbol{x}(n) \tag{5.7.69}$$

$$\boldsymbol{v}(n)=\boldsymbol{R}(n)\boldsymbol{p}(n) \tag{5.7.70}$$

$$\alpha(n)=\frac{\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}(n)\boldsymbol{g}(n-1)}{\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}(n)\boldsymbol{v}(n)} \tag{5.7.71}$$

$$\boldsymbol{w}(n)=\boldsymbol{w}(n-1)+\alpha(n)\boldsymbol{p}(n) \tag{5.7.72}$$

$$\boldsymbol{g}(n)=\lambda\boldsymbol{g}(n-1)-\alpha(n)\boldsymbol{R}(n)\boldsymbol{v}(n)+\boldsymbol{x}(n)[d(n)-\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(n)\boldsymbol{w}(n-1)] \tag{5.7.73}$$

$$\beta(n)=\frac{[\boldsymbol{g}(n)-\boldsymbol{g}(n-1)]^{\mathrm{T}}\boldsymbol{g}(n)}{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(n-1)\boldsymbol{g}(n-1)} \tag{5.7.74}$$

$$\boldsymbol{p}(n+1)=-\boldsymbol{g}(n)+\beta(n)\boldsymbol{p}(n) \tag{5.7.75}$$

算法 5.7.5 (自适应共轭梯度算法 2 (CG2))[79]

步骤 1 初始化 $\boldsymbol{w}(0)=\boldsymbol{0}$

步骤 2 对 $n=1,2,\cdots$，计算

$$\tilde{\boldsymbol{R}}(n)=\frac{1}{m}\sum_{i=0}^{m-1}\boldsymbol{x}(n-i)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(n-i) \tag{5.7.76}$$

$$\tilde{\boldsymbol{r}}(n)=\frac{1}{m}\sum_{i=0}^{m-1}d(n-i)\boldsymbol{x}(n-i) \tag{5.7.77}$$

并令 $\boldsymbol{g}(0)=\tilde{\boldsymbol{r}}(n)-\tilde{\boldsymbol{R}}(n)\boldsymbol{w}(0)$, $\boldsymbol{p}(1)=\boldsymbol{g}(0)$。

对 $k=1,2,\cdots,k_{\max}$，执行以下迭代：

$$\alpha(k)=\frac{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(k-1)\boldsymbol{g}(k-1)}{\boldsymbol{p}(k)\tilde{\boldsymbol{R}}(n)\boldsymbol{p}(k)} \tag{5.7.78}$$

$$\boldsymbol{w}(k)=\boldsymbol{w}(k-1)+\alpha(k)\boldsymbol{p}(k) \tag{5.7.79}$$

$$\boldsymbol{g}(k)=\boldsymbol{g}(k-1)-\alpha(k)\tilde{\boldsymbol{R}}(n)\boldsymbol{p}(k) \tag{5.7.80}$$

$$\beta(k)=\frac{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(k)\boldsymbol{g}(k)}{\boldsymbol{g}^{\mathrm{T}}(k-1)\boldsymbol{g}(k-1)} \tag{5.7.81}$$

$$\boldsymbol{p}(k+1)=-\boldsymbol{g}(k)+\beta(k)\boldsymbol{p}(k) \tag{5.7.82}$$

输出 当 $k=k_{\max}$ 时，取

$$\tilde{\boldsymbol{w}}(n)=\boldsymbol{w}(k_{\max}) \tag{5.7.83}$$

$$\boldsymbol{w}(0)=\tilde{\boldsymbol{w}}(n) \tag{5.7.84}$$

下面是这两种算法的比较：

(1) 算法 CG1 假定样本自相关矩阵和样本互相关向量是可变的。在每一个时刻 n，共轭梯度算法只执行 1 次，不进行迭代。算法 2 在每一个时刻 n 需执行 $k_{\max}$ 步内部迭代。在每一次内部迭代，假定样本自相关矩阵和样本互相关向量不变。

(2) 样本自相关矩阵和样本互相关向量的估计：算法 CG1 利用指数衰减窗，算法 CG2 使用固定窗。采用固定窗函数，可以得到比较快的收敛，但失调 (即滤波器输出均方误差) 大；而指数衰减窗可以同时得到比较快的收敛和比较小的失调。

5.8 仿射投影算法

从 LMS 自适应算法的分析知，基本 LMS 算法收敛性能差有两个主要原因：步长 μ 不容易选择恰当；滤波器输入信号有可能是相关信号。

为了改进 LMS 自适应算法的收敛性能，Ozeki 与 Umeda 于 1984 年提出了下面的自适应算法 [348]：

$$\hat{\boldsymbol{a}}_n = \boldsymbol{X}_n(\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X}_n)^{-1}\boldsymbol{x}_n \tag{5.8.1}$$

$$\boldsymbol{u}_n = \boldsymbol{x}_n - \boldsymbol{X}_n\hat{\boldsymbol{a}}_n \tag{5.8.2}$$

$$e(n) = d(n) - \boldsymbol{w}_n^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_n \tag{5.8.3}$$

$$\boldsymbol{w}_{n+1} = \boldsymbol{w}_n + \frac{\boldsymbol{u}_n}{\boldsymbol{u}_n^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_n}e^*(n) \tag{5.8.4}$$

这一算法经过改造后，可以变成计算量界于 LMS 算法和 RLS 算法之间的一种自适应算法，称为仿射投影算法 (affine projection algorithm，APA)。

考虑 M 阶滤波器 $\boldsymbol{w} = [w_0, w_1, \cdots, w_{M-1}]^{\mathrm{T}}$，其输出

$$y(n) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_n \tag{5.8.5}$$

式中，$\boldsymbol{x}_n = [x(n), x(n-1), \cdots, x(n-M+1)]^{\mathrm{T}}$ 为滤波器输入向量。

使用 L 个输出信号组成一数据块，即定义向量

$$\boldsymbol{y}_n = [y(n), y(n-1), \cdots, y(n-L+1)]^{\mathrm{T}} \tag{5.8.6}$$

与之对应的 $M \times L$ 输入信号矩阵为

$$\boldsymbol{X}_n = [\boldsymbol{x}_n, \boldsymbol{x}_{n-1}, \cdots, \boldsymbol{x}_{n-L+1}] \tag{5.8.7}$$

于是，滤波器的输出可以用数据块即向量的形式写作

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{X}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}^* \tag{5.8.8}$$

在非平稳系统 (如移动通信中的无线信道等) 中，滤波器 $\boldsymbol{w}$ 应该是时变的，以便跟踪时变系统的变化。取滤波器的自适应更新公式为

$$\boldsymbol{w}_n = \boldsymbol{w}_{n-1} + \mu\Delta\boldsymbol{w}_n \tag{5.8.9}$$

将式 (5.8.9) 代入式 (5.8.8) 得

$$\boldsymbol{y}_n = \boldsymbol{X}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}_{n-1}^* + \mu\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{w}_n^*$$

在上式中，令 $\mu=1$，$L\times 1$ 残差向量

$$\boldsymbol{e}_n=\boldsymbol{y}_n-\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{T}}\boldsymbol{w}_{n-1}^* \tag{5.8.10}$$

则有

$$\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{w}_n^*=\boldsymbol{e}_n \quad 或 \quad \boldsymbol{X}_n^{\mathrm{H}}\Delta\boldsymbol{w}_n=\boldsymbol{e}_n^* \tag{5.8.11}$$

即自适应算法公式 (5.8.9) 的更新量 $\Delta\boldsymbol{w}_n$ 由 L 个线性方程决定。

方程组 (5.8.11) 的解 $\Delta\boldsymbol{w}_n$ 分以下两种情况。

情况 1 欠定方程

当 $1\leqslant L<M$ 时，方程组 (5.8.11) 为欠定方程，有唯一的最小范数解

$$\Delta\boldsymbol{w}_n=\boldsymbol{X}_n(\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X}_n)^{-1}\boldsymbol{e}_n^* \tag{5.8.12}$$

此时，自适应算法式 (5.8.9) 变为

$$\boldsymbol{w}_n=\boldsymbol{w}_{n-1}+\mu\boldsymbol{X}_n(\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X}_n)^{-1}\boldsymbol{e}_n^* \tag{5.8.13}$$

显然，若 $L=1$，则 $\Delta\boldsymbol{w}_n=e_n^*\dfrac{\boldsymbol{x}_n}{\boldsymbol{x}_n^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_n}$，则算法式 (5.8.13) 退化为归一化 LMS 算法：

$$\boldsymbol{w}_n=\boldsymbol{w}_{n-1}+\mu e_n^*\frac{\boldsymbol{x}_n}{\boldsymbol{x}_n^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_n} \tag{5.8.14}$$

情况 2 超定方程

当 $L\geqslant M$ 时，方程组 (5.8.11) 为超定方程，其唯一解为最小二乘解

$$\Delta\boldsymbol{w}_n=(\boldsymbol{X}_n\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{X}_n\boldsymbol{e}_n^* \tag{5.8.15}$$

自适应算法式 (5.8.9) 为

$$\boldsymbol{w}_n=\boldsymbol{w}_{n-1}+\mu(\boldsymbol{X}_n\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{X}_n\boldsymbol{e}_n^* \tag{5.8.16}$$

令 $\mu=1,\boldsymbol{R}_n=\dfrac{1}{L}\boldsymbol{X}_n\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{r}_n=\dfrac{1}{L}\boldsymbol{X}_n\boldsymbol{y}_n^*$，利用式 (5.8.10)，可将式 (5.8.16) 等价写为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{w}_n&=\boldsymbol{w}_{n-1}+(\boldsymbol{X}_n\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{X}_n(\boldsymbol{y}_n^*-\boldsymbol{X}_n^{\mathrm{H}}\boldsymbol{w}_{n-1})\\&=\boldsymbol{w}_{n-1}-\boldsymbol{R}_n^{-1}(\boldsymbol{R}_n\boldsymbol{w}_{n-1}-\boldsymbol{r}_n)\end{aligned} \tag{5.8.17}$$

与式 (5.6.6) 一致。这说明，当 $L\geqslant M$ 时，自适应算法公式 (5.8.9) 与 RLS 算法等价。

自适应算法公式 (5.8.13) 称为仿射投影算法 [348]，有时也称欠定递推最小二乘算法 [31]。

仿射投影算法是一种计算复杂度和性能介于 LMS 算法和 RLS 算法之间的自适应算法，近几年已经成为自适应滤波应用中一种有名的方法。快速仿射投影算法 [168],[441] 可以提高仿射投影算法的收敛速率。此外，文献 [401] 给出了仿射投影算法的收敛性能分析，文献 [391] 介绍了仿射投影算法在回声对消中的应用。关于多信道情况下的仿射投影和快速仿射投影算法，可参见文献 [54]。

5.9 自然梯度算法

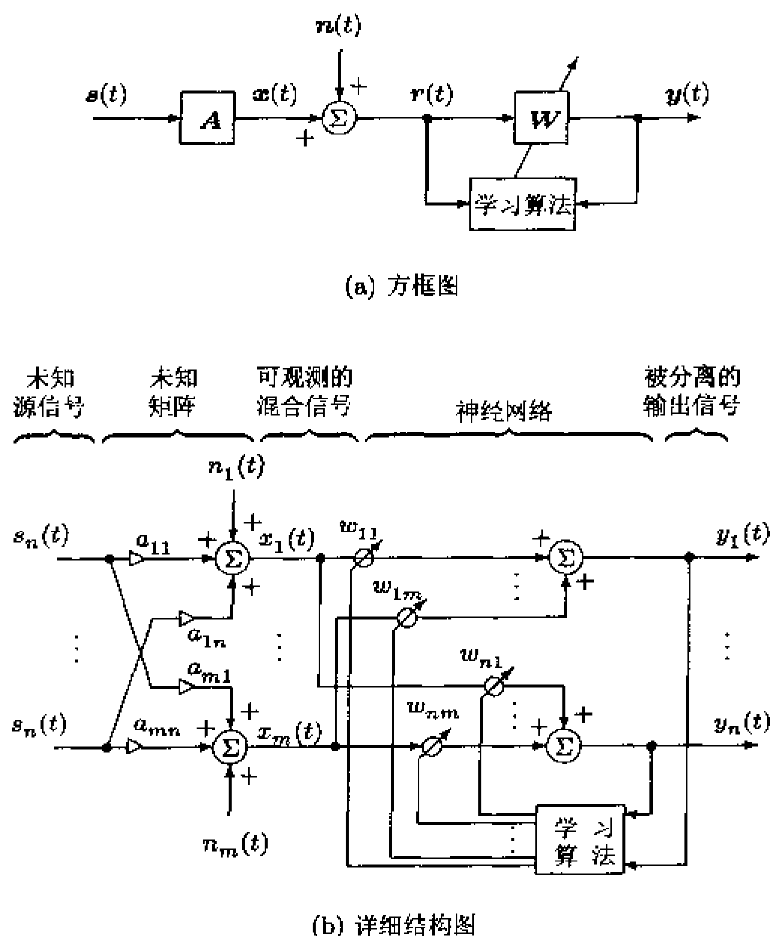
令观测数据模型为

$$\boldsymbol{x}(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}(t) \tag{5.9.1}$$

式中，$\boldsymbol{A}$ 为混合矩阵 (mixing matrix)，$\boldsymbol{s}(t)$ 代表源信号向量。在源信号相互统计独立的情况下，希望使用一神经网络从观测数据向量 $\boldsymbol{x}(t)$ 实时恢复源信号。这一过程称为盲信号分离。图 5.9.1 画出了混合模型与盲信号分离的前馈神经网络，其中，图 (a) 为方框图，图 (b) 为详细结构图。如图 5.9.1 所示，令前馈神经网络的权系数为 $w_{ij}, i = 1, 2, \cdots, n$，$j = 1, 2, \cdots, m$，记 t 时刻的 $n \times m$ 权矩阵 $\boldsymbol{W}(t) = [w_{ij}(t)]$，则

$$\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{W}(t)\boldsymbol{x}(t) \tag{5.9.2}$$

$\boldsymbol{W}(t)$ 在盲信号处理中称为分离矩阵 (separating matrix) 或解混合矩阵 (de-mixing matrix)，在神经计算和神经网络中称为突触权矩阵。



(a) 方框图

(b) 详细结构图

图 5.9.1 混合模型与盲信号分离的前馈神经网络

盲信号分离的目的是寻找分离矩阵 $\boldsymbol{B}$ 使得 $\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{G}$，其中，$\boldsymbol{G}$ 为广义交换矩阵。因此，希望使用自适应学习算法，收敛后的突触权矩阵 $\boldsymbol{W}_\infty$ 满足关系式：

$$\boldsymbol{W}_\infty \boldsymbol{A}=\boldsymbol{G}$$

此时，神经网络的输出向量

$$\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{W}(t)\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{W}_\infty \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}(t)=\boldsymbol{G}\boldsymbol{s}(t) \tag{5.9.3}$$

因此，神经网络在时间 t 的源信号分离的性能由合成矩阵 $\boldsymbol{T}(t)\triangleq\boldsymbol{W}(t)\boldsymbol{A}$ 衡量，它描述混合 - 分离模型 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{T}(t)\boldsymbol{s}(t)$ 中信号被分离为独立分量的“精确度”。

下面从神经网络系统输出的互信息的最小化推导权矩阵的更新公式。为此，假定系统可以用 $\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{W}\boldsymbol{x}(t)$ 表征。

最小互信息 (minimum mutual information, MMI) 的基本思想是：选择神经网络的权矩阵 $\boldsymbol{W}$，使输出 $\boldsymbol{y}$ 的各个分量之间的相依性最小化，即使得输出向量 $\boldsymbol{y}(t)$ 的各个分量尽可能地相互统计独立。这一方法称为独立分量分析 (independent component analysis, ICA)，是 Comon 于 1994 年提出的 [102]。现在，独立分量分析已成为信号处理、模式识别和神经计算等中的一种著名方法。

作为信号之间相依性的测度，通常采用输出向量 $\boldsymbol{y}$ 的概率密度函数 $p_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})$ 与其分解形式 $\tilde{p}_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})$ 之间的 Kullaback-Leibler (KL) 散度 $D(\boldsymbol{W})$，且

$$\begin{aligned}D(\boldsymbol{W})&=\text{KL}[p_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})\|\tilde{p}_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})]\\&\overset{\text{def}}{=}\int p_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})\log\frac{p_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})}{\tilde{p}_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})}\mathrm{d}\boldsymbol{y}\end{aligned}$$

式中，$\tilde{p}_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})$ 是 $\boldsymbol{y}$ 的边缘概率密度函数的乘积，即 $\tilde{p}_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})=\prod_{i=1}^n p_i(y_i,\boldsymbol{W})$。

显然，若输出各个分量 $y_i(t)$ 相互独立，则 $p_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})=\tilde{p}_y(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})$ 即 $D(\boldsymbol{W})=0$。反之，$D(\boldsymbol{W})=0$ 意味着 $y_i(t)$ 相互独立。

信号分量之间的 KL 散度与它们之间的互信息等价 $I(\boldsymbol{W})\equiv D(\boldsymbol{W})$，并且互信息为非负值，即 $I(\boldsymbol{W})\geqslant 0$。因此，当且仅当输出各分量独立时，互信息最小 (等于零)，即

$$I(\boldsymbol{W})=0 \quad \text{iff} \quad \boldsymbol{W}=\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}^{-1} \tag{5.9.4}$$

这一结果是 Comon 于 1994 年最先得到的 [102]。

互信息也可以用熵表示为 [488]

$$I(\boldsymbol{W})=D(\boldsymbol{W})=-H(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})+\sum_{i=1}^n H(y_i,\boldsymbol{W}) \tag{5.9.5}$$

互信息最小的条件是：熵 $H(\boldsymbol{y},\boldsymbol{W})$ 取最大值 $\sum_{i=1}^n H(y_i,\boldsymbol{W})$。就是说，互信息最小与最大熵等价。

为了衡量输出之间的独立性，除了利用它们之间的二阶相关函数外，还必须使用它们之间的高阶统计量。因此，必须对输出向量 $\boldsymbol{y}(t)$ 的各个分量进行相同的非线性变换，令非线性变换为 $g(\cdot)$，则

$$z(t) = [g(y_1(t)), g(y_2(t)), \cdots, g(y_n(t))]^{\mathrm{T}}$$

业已证明 [488]

$$\max H(\boldsymbol{y}, \boldsymbol{W}) = \max H(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{W})$$

和

$$\frac{\partial H(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} = \boldsymbol{W}^{-\mathrm{T}} - \mathrm{E}\{\phi(\boldsymbol{y})\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\}$$

式中

$$\phi(\boldsymbol{y}) = \left[-\frac{g''(y_1)}{g'(y_1)}, -\frac{g''(y_2)}{g'(y_2)}, \cdots, -\frac{g''(y_n)}{g'(y_n)}\right]^{\mathrm{T}}$$

更新权矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的梯度算法为

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{W}}{\mathrm{d}t} = \eta \frac{\boldsymbol{H}(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} = \eta \left(\boldsymbol{W}^{-\mathrm{T}} - \mathrm{E}\{\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{y})\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\}\right) \tag{5.9.6}$$

梯度算法中的期望项 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{y})\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\}$ 用瞬时值 $\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{y})\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}$ 代替后，即得到盲信号分离的随机梯度算法:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{W}}{\mathrm{d}t} = \eta \left(\boldsymbol{W}^{-\mathrm{T}} - \boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{y})\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\right) \tag{5.9.7}$$

这一算法是 Bell 和 Sejnowski 于 1995 年提出 [35]。

上述随机梯度优化方法的主要缺点是收敛比较慢。因此，希望有一种优化方法既能够保留随机梯度方法的简单性和数值稳定性，又能够得到很好的渐近收敛性。还希望其性能与混合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 无关，以便即使当 $\boldsymbol{A}$ 接近奇异矩阵时，算法仍然能够工作得很好。这是完全可以实现的，因为如果将一可逆矩阵 $\boldsymbol{G}^{-1}$ 作用于随机梯度算法公式 (5.9.7) 中的矩阵:

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{W}}{\mathrm{d}t} = \eta \boldsymbol{G}^{-1} \frac{\partial H(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}}$$

则算法的收敛性能和数值稳定性能都将有明显的提高 (参见文献 [14]，[488])。

1997 年，Yang 与 Amari [488] 从矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的参数空间的 Riemann 结构出发，证明了矩阵 $\boldsymbol{G}$ 的自然选择为

$$\boldsymbol{G}^{-1} \frac{\partial H(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} = \frac{\partial H(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} \boldsymbol{W}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W}$$

$\frac{\partial H(\boldsymbol{z}, \boldsymbol{W})}{\partial \boldsymbol{W}} \boldsymbol{W}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W}$ 称为自然梯度 (natural gradient) [14]。于是，标准梯度算法可以改进为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{W}}{\mathrm{d}t} &= \eta \left(\boldsymbol{W}^{-\mathrm{T}} - E\{\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{y})\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\}\right) \boldsymbol{W}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W} \\ &= \eta(\boldsymbol{I} - E\{\boldsymbol{\phi}(\boldsymbol{y})\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\})\boldsymbol{W}\end{aligned}$$

而随机梯度算法可以改进为

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{W}}{\mathrm{d}t}&=\eta\left(\boldsymbol{W}^{-\mathrm{T}}-\phi(\boldsymbol{y})\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\\&=\eta(\boldsymbol{I}-\phi(\boldsymbol{y})\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{W}\end{aligned}$$

由此得到著名的自然梯度算法 (natural gradient algorithm) [14],[488]

$$\boldsymbol{W}(k+1)=\boldsymbol{W}(k)+\eta(k)\left[\boldsymbol{I}-\phi(\boldsymbol{y}(k))\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(k)\right]\boldsymbol{W}(k) \tag{5.9.8}$$

由自然梯度算法易知，神经网络收敛到平衡点的条件是:

$$\mathrm{E}\{\phi(\boldsymbol{y})\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\}=\boldsymbol{I}\quad\text{或}\quad\mathrm{E}\{\phi(y_i(t))y_j(t)\}=\delta_{ij} \tag{5.9.9}$$

自然梯度算法明显优于普通的随机梯度算法。在执行自然梯度算法时，学习速率 $\eta(k)$ 的选择是一个重要问题，可参考文献 [525] 和文献 [286]。

Zhu 和 Zhang 将独立分量分析的自然梯度算法与非线性主分量分析的递推最小二乘算法相结合，提出了基于自然梯度算法的递推最小二乘算法 [513]。

本章小结

最优化问题的求解取决于标量目标函数关于自变元 (矩阵或向量) 的梯度和 Hessian 矩阵。本章首先分别以实矩阵 (含实向量) 和复矩阵 (含复向量) 为目标函数的变元，讨论了梯度、共轭梯度以及 Hessian 矩阵的计算方法。特别地，矩阵微分在求梯度矩阵和 Hessian 矩阵中起着重要的作用。

在大量的工程问题中，最优化的核心问题是如何保证解在学习过程中的收敛。在各类学习算法中，梯度算法是最简单和最基本的算法。梯度算法及其改进构成了本章的另一个核心部分。作为梯度算法的改进，本章分别介绍了递推最小二乘算法、共轭梯度算法、仿射投影算法和自然梯度算法。

习　题

5.1 令 $\boldsymbol{y}$ 是一实值观测数据向量，由 $\boldsymbol{y}=\alpha\boldsymbol{x}+\boldsymbol{v}$ 给出，其中，α 为实标量，$\boldsymbol{x}$ 代表一实值确定性过程，而加性噪声向量 $\boldsymbol{v}$ 具有零均值向量，协方差矩阵 $\boldsymbol{R}_v=\mathrm{E}\{\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\}$。试求一最优滤波器向量 $\boldsymbol{w}$，使得估计子 $\hat{\alpha}=\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$ 是一个方差最小的无偏估计子。

5.2 令 $f(t)$ 为一已知函数。考虑二次型函数的最小化:

$$\min Q(x)=\min\int_0^1[f(t)-x_0-x_1t-\cdots-x_nt^n]^2\mathrm{d}t$$

判断与线性方程组对应的矩阵是否病态?

5.3 考虑方程 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{A\theta}+\boldsymbol{e}$，其中，$\boldsymbol{e}$ 为误差向量。定义加权误差平方和

$$E_w \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{e}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{e}$$

其中，$\boldsymbol{W}$ 为一 Hermitian 正定矩阵，它对误差起加权作用。

(1) 求使 E_w 最小化的参数向量 $\boldsymbol{\theta}$ 的解。这一解称为 $\boldsymbol{\theta}$ 的加权最小二乘估计。

(2) 利用 LDL^H 分解 $\boldsymbol{W}=\boldsymbol{LDL}^H$，证明加权最小二乘准则相当于使误差或数据向量进行预白化。

5.4 令 $\boldsymbol{y}$ 是一实值随机向量，由 $\boldsymbol{y}=\alpha\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}$ 描述。其中，$\boldsymbol{x}$ 是一个确定向量；α 为常数；$\boldsymbol{e}$ 为一零均值的随机向量，其协方差矩阵为 $\boldsymbol{R}_e$。现在希望利用数据向量 $\boldsymbol{y}$，确定 α 的最优线性无偏估计。为此，令 $\hat{\alpha}=\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$，求最优滤波器 $\boldsymbol{w}$。

5.5 考虑上题中 $\boldsymbol{y}$ 为复向量的情况。若令代价函数为

$$f(\boldsymbol{w})=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_e\boldsymbol{w}$$

并且给滤波器加约束条件 $\mathrm{Re}(\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})=b$，其中，$b$ 为一常数。试求最优滤波器 $\boldsymbol{w}$。

5.6 解释下列有约束最优化问题是否有解：

(1) $\min(x_1+x_2)$，约束条件为 $x_1^2+x_2^2=2, 0\leqslant x_1\leqslant 1,\ 0\leqslant x_2\leqslant 1$；

(2) $\min(x_1+x_2)$，约束条件为 $x_1^2+x_2^2\leqslant 1,\ x_1+x_2=4$；

(3) $\min(x_1x_2)$，约束条件为 $x_1+x_2=3$。

5.7 考虑约束优化问题

$$\min(x-1)(y+1),\qquad \text{约束条件为 } x-y=0$$

利用 Lagrange 乘数法证明极小点为 $(1,1)$，且 Lagrange 乘数 $\lambda=1$。若 Lagrange 函数取

$$\psi(x,y)=(x-1)(y+1)-1(x-y)$$

证明 $\phi(x,y)$ 在 $(0,0)$ 有一个鞍点，即点 $(0,0)$ 不能使 $\psi(x,y)$ 极小化。

5.8 求解约束优化问题 $\min J(x,y,z)=x^2+y^2+z^2$，约束条件为 $3x+4y-z=25$。

5.9 证明

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{UVW})=(\mathrm{d}\boldsymbol{U})\boldsymbol{VW}+\boldsymbol{U}(\mathrm{d}\boldsymbol{V})\boldsymbol{W}+\boldsymbol{UV}(\mathrm{d}\boldsymbol{W})$$

5.10 证明

$$\mathrm{d}[\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})]=2\mathrm{tr}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\mathrm{d}\boldsymbol{X})$$

5.11 求矩阵函数 $\boldsymbol{AXB}$ 和 $\boldsymbol{AX}^{-1}\boldsymbol{B}$ 的 Jacobian 矩阵和梯度矩阵。

5.12 求矩阵函数 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX},\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{XAX}$ 和 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}^{\mathrm{T}}$ 的梯度矩阵。

5.13 求行列式对数 $\log|\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}|,\log|\boldsymbol{XAX}^{\mathrm{T}}|$ 和 $\log|\boldsymbol{XAX}|$ 的 Jacobian 矩阵与梯度矩阵。

5.14 证明：若 $\boldsymbol{F}$ 是矩阵函数，并且可二次微分，则

$$\mathrm{d}^2\log|\boldsymbol{F}| = -\mathrm{tr}(\boldsymbol{F}^{-1}\mathrm{d}\boldsymbol{F})^2 + \mathrm{tr}(\boldsymbol{F}^{-1})\mathrm{d}^2\boldsymbol{F}$$

5.15 假定 $\boldsymbol{x}$ 是 N 维数据或文本向量，现在希望寻找一 $n\times N$ 线性变换矩阵 $\boldsymbol{W}$ 对 $\boldsymbol{x}$ 进行数据压缩：$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{x}$，使得 $n \ll N$。定义目标函数 $J_W = \mathrm{tr}[(\boldsymbol{W}\boldsymbol{S}_{xw}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{W}\boldsymbol{S}_{xb}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}]$，其中，$\boldsymbol{S}_{xw}$ 和 $\boldsymbol{S}_{xb}$ 分别是原数据向量 $\boldsymbol{x}$ 的类内和类间散布矩阵。线性变换矩阵的优化准则是使目标函数 J_W 最大化。设 $\boldsymbol{S}_{xw}^{-1}\boldsymbol{S}_{xb}$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_N$ $(\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_N)$，并且 $\boldsymbol{u}_i$ 是与特征值 λ_i 对应的特征向量。证明 $\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_N]$，并且 $\max J_W = \sum_{i=1}^{n}\lambda_i$。(提示：使用矩阵微分求梯度矩阵 $\partial J_W/\partial \boldsymbol{W}$。)

5.16 证明 [296]

$$\mathrm{d}(\boldsymbol{F}^{\dagger}\boldsymbol{F}) = \boldsymbol{F}^{\dagger}(\mathrm{d}\boldsymbol{F})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{F}^{\dagger}\boldsymbol{F}) + [\boldsymbol{F}^{\dagger}(\mathrm{d}\boldsymbol{F})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{F}^{\dagger}\boldsymbol{F})]^{\mathrm{T}}$$
$$\mathrm{d}(\boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^{\dagger}) = (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^{\dagger})(\mathrm{d}\boldsymbol{F})\boldsymbol{F}^{\dagger} + [(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{F}\boldsymbol{F}^{\dagger})(\mathrm{d}\boldsymbol{F})\boldsymbol{F}^{\dagger}]^{\mathrm{T}}$$

式中，$\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵。

5.17 已知线性方程

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \cdots & \lambda_n \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \lambda_1^{n-1} & \lambda_2 & \cdots & \lambda_n^{n-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathrm{d}\lambda_1 \\ \mathrm{d}\lambda_2 \\ \vdots \\ \mathrm{d}\lambda_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{tr}(\mathrm{d}\boldsymbol{X}) \\ \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}_0\mathrm{d}\boldsymbol{X}) \\ \vdots \\ \mathrm{tr}(\boldsymbol{X}_0^{n-1}\mathrm{d}\boldsymbol{X}) \end{bmatrix}$$

求 $\mathrm{d}\lambda_i$。

5.18 计算标量函数 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 和 $f(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的 Hessian 矩阵。

5.19 证明标量函数 $f(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})$ 的 Hessian 矩阵为

$$\boldsymbol{H}[f(\boldsymbol{X})] = \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\otimes\boldsymbol{A} + \boldsymbol{B}\otimes\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$$

5.20 求行列式对数 $\log|\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}|, \log|\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}|$ 和 $\log|\boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}|$ 的 Hessian 矩阵。

5.21 求标量函数 $f(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}$ 的 Hessian 矩阵。

5.22 令观测数据向量由线性回归模型

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} + \boldsymbol{\epsilon}, \qquad \mathrm{E}\{\boldsymbol{\epsilon}\} = \boldsymbol{0}, \quad \mathrm{E}\{\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}^{\mathrm{T}}\} = \sigma^2\boldsymbol{I}$$

产生。现在希望设计一个滤波器矩阵 $\boldsymbol{A}$，其输出向量 $\boldsymbol{e} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}$ 满足 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}-\boldsymbol{\epsilon}\} = \boldsymbol{0}$，并且可以使得 $\mathrm{E}\{(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{\epsilon})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{e}-\boldsymbol{\epsilon})\}$ 最小化。证明这个最优化问题等效为

$$\min\,[\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}) - 2\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})]$$

约束条件为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{O}$，其中，$\boldsymbol{O}$ 为零矩阵。

5.23 证明最优化问题

$$\min\,[\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}) - 2\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})], \qquad \text{约束条件为} \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{O} \quad (\text{零矩阵})$$

的解矩阵为 $\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\dagger}$。

5.24 证明：无约束问题

$$\min\,[(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{V} + \boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}})^{\dagger}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})]$$

与下面的约束问题具有相同的解向量 $\boldsymbol{\beta}$：

$$\min\,[(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})\boldsymbol{V}^{\dagger}(\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta})]$$

约束条件为 $(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\dagger})\boldsymbol{X}\boldsymbol{\beta} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\dagger})\boldsymbol{y}$。

5.25 证明约束最优化问题

$$\min\ \frac{1}{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}, \qquad \text{约束条件为} \quad \boldsymbol{C}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

具有唯一解 $\boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{C}^{\dagger}\boldsymbol{b}$。

5.26 令矩阵 $\boldsymbol{Y} \in R^{n\times m}$，$\boldsymbol{Z} \in R^{n\times(n-m)}$，它们的列构成线性无关的集合。如果将服从约束条件 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的解向量表示为 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Y}\boldsymbol{x}_Y + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{x}_Z$，其中，$\boldsymbol{x}_Y$ 和 $\boldsymbol{x}_Z$ 分别是某个 $m\times 1$ 和 $(n-m)\times 1$ 向量。证明解向量为 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Y}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{Y})^{-1}\boldsymbol{b} + \boldsymbol{Z}\boldsymbol{x}_Z$。

5.27 若约束最优化问题为 $\min\ \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}\boldsymbol{A}^{T})$，约束条件是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{W}$，证明

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{W}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_0^{\dagger}\boldsymbol{X})^{\dagger}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}_0^{\dagger} + \boldsymbol{Q}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{V}_0\boldsymbol{V}_0^{\dagger})$$

其中，$\boldsymbol{V}_0 = \boldsymbol{V} + \boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{Q}$ 是一任意矩阵。

5.28 约束最优化问题为 $\min\ \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}})$，约束条件为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{O}$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{I}$。证明：最优化问题的解为 [296, pp.302~303]

$$\boldsymbol{A} = (\boldsymbol{S}\boldsymbol{M}\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}})^{-1/2}\boldsymbol{S}\boldsymbol{M}, \qquad \boldsymbol{M} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\dagger}$$

5.29 [296, p.367] 令 $\boldsymbol{S}$ 和 $\boldsymbol{\Phi}$ 是两个已知的 $m\times m$ 正定矩阵，并且 $\boldsymbol{\Phi}$ 为对角矩阵。令 f 是一实值函数，由

$$f(\boldsymbol{A}) = \log|\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\Phi}| + \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{\Phi})^{-1}\boldsymbol{S}\right)$$

定义，其中，$\boldsymbol{A} \in R^{m\times n}$，$1 \leqslant n \leqslant m$。证明：

(1) 当 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{\Phi}^{1/2}\boldsymbol{T}(\boldsymbol{\Lambda} - \boldsymbol{I}_n)^{1/2}$ 时，实值函数 f 达到最小。式中，$\boldsymbol{\Phi}$ 是一个 $n\times n$ 对角矩阵，它包含了矩阵 $\boldsymbol{\Phi}^{-1/2}\boldsymbol{S}\boldsymbol{\Phi}^{-1/2}$ 的 n 个最大特征值，而矩阵 $\boldsymbol{T}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，由矩阵 $\boldsymbol{\Phi}^{-1/2}\boldsymbol{S}\boldsymbol{\Phi}^{-1/2}$ 的 n 个主特征向量组成。

(2) 实值函数 f 的最小值为

$$m + \log|\boldsymbol{S}| + \sum_{i=n+1}^{m}(\lambda_i - \log\lambda_i - 1)$$

式中，$\lambda_{n+1}, \lambda_{n+2}, \cdots, \lambda_m$ 表示矩阵 $\boldsymbol{\Phi}^{-1/2}\boldsymbol{S}\boldsymbol{\Phi}^{-1/2}$ 的 $m-n$ 个最小的特征值。

5.30 令 $p>1$, $a_i \geqslant 0$, $i=1,2,\cdots,n$, 证明: 对每一组满足 $\sum_{i=1}^{n} x_i^q = 1\ (q=p/(p-1))$ 的非负实数 $x_1,x_2,\cdots,x_n$, 不等式

$$\sum_{i=1}^{n} a_i x_i \leqslant \left(\sum_{i=1}^{n} a_i^p\right)^{1/p}$$

成立。这一不等式称为 $\left(\sum_{i=1}^{n} a_i^p\right)^{1/p}$ 的表示定理 [296, p.218], 并且等号成立, 当且仅当 $a_1=a_2=\cdots=a_n=0$ 或者 $x_i^q = a_i^p \left(\sum_{k=1}^{n} a_k^p\right)^{-1}$, $i=1,2,\cdots,n$。

5.31 考虑 M 个实谐波信号的 Pisarenko 谐波分解的下列推广 [264]。令噪声子空间的维数大于 1, 于是张成噪声子空间的矩阵 $\boldsymbol{V}_n$ 的每一个列向量的元素都满足

$$\sum_{k=0}^{2M} v_k \mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega_i k} = \sum_{k=0}^{2M} v_k \mathrm{e}^{-\mathrm{j}\omega_i k} = 0, \quad 1 \leqslant i \leqslant M$$

令 $\bar{\boldsymbol{p}} = \boldsymbol{V}_n \boldsymbol{\alpha}$ 表示 $\boldsymbol{V}_n$ 的列向量的非退化线性组合。所谓非退化, 乃是指由向量 $\bar{\boldsymbol{p}} = [\bar{p}_0, \bar{p}_1, \cdots, \bar{p}_{2M}]^{\mathrm{T}}$ 的元素构造的多项式 $p(z)$ 至少具有 $2M$ 阶, 即 $p(z) = \bar{p}_0 + \bar{p}_1 z + \cdots + \bar{p}_{2M} z^{2M}$, $\bar{p}_{2M} \neq 0$。于是, 这一多项式也满足上面的式子。这意味着, 所有谐波频率均可由多项式 $p(z)$ 位于单位圆上的 $2M$ 个根求出。现在希望选择系数向量 $\boldsymbol{\alpha}$ 满足条件: $p_0 = 1$ 和 $\sum_{k=1}^{K} p_k^2 = \min$。

(1) 令 $\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{V}_n$ 的第一行, 而 $\boldsymbol{V}$ 是由 $\boldsymbol{V}_n$ 的其他所有行组成的矩阵。若 $\boldsymbol{p}$ 是由 $\bar{\boldsymbol{p}}$ 除第一个元素以外的其他元素组成的向量, 试证明

$$\boldsymbol{\alpha} = \arg\ \min \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{V} \boldsymbol{\alpha}$$

约束条件为 $\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\alpha} = 1$。

(2) 利用 Lagrange 乘子法证明约束优化问题的解为

$$\boldsymbol{\alpha} = \frac{(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V})^{-1}\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V})^{-1}\boldsymbol{v}}, \qquad \boldsymbol{p} = \frac{\boldsymbol{V}(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V})^{-1}\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V})^{-1}\boldsymbol{v}}$$

5.32 设矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的秩 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{X}) \leqslant r$, 证明: 对所有满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}_r$ 的半正交矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和所有矩阵 $\boldsymbol{Z} \in R^{n\times r}$, 恒有

$$\min \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X} - \boldsymbol{Z}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})(\boldsymbol{X} - \boldsymbol{Z}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\right) = 0$$

第 6 章　奇异值分析

Beltrami (1835–1899) 和 Jordan (1838–1921) 二位学者被公认为是奇异值分解的创始人：Beltrami 于 1873 年发表了奇异值分解的第一篇论文 [38]，一年后 Jordan 发表了自己对奇异值分解的独立推导 [241]。现在，奇异值分解 (包括各种推广) 已是数值线性代数的最有用和最有效的工具之一，它在统计分析、信号与图像处理、系统理论和控制中被广泛地应用。

本章先在 6.1 节介绍数值算法的数值稳定性与条件数的概念，以引出矩阵的奇异值分解的必要性；然后在 6.2 节详细讨论奇异值分解 (定义、几何意义与唯一性)，奇异值的性质以及如何利用奇异值分解求解秩亏缺的最小二乘问题。6.3 节讨论奇异值分解的数值计算。从数值性能考虑，如果线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的形式，则 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解应该利用两个矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解进行计算，这正是 6.4 节的讨论焦点。6.5 节 ~ 6.7 节介绍奇异值分解的几种重要推广：6.5 节是矩阵对 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义奇异值分解，6.6 节是矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的约束奇异值分解，6.7 节则是结构奇异值。6.8 节分别专题介绍奇异值分解在电子线路、系统理论和信号处理中的几个典型应用。最后，6.9 节介绍广义奇异值分解的应用。

6.1　数值稳定性与条件数

在信息科学与工程等许多应用中，在对数据进行处理时，常常需要考虑一个重要问题：实际的观测数据存在某种程度的不确定性或误差，而且对数据进行的数值计算也总是伴随有误差。误差有何影响？数据处理和数值分析的算法稳定吗？为了回答这些问题，下面两个概念是极其重要的：

(1) 一种算法的数值稳定性；

(2) 所涉及问题的条件或扰动分析。

假定用 f 表示某个用数学定义的问题，此 f 作用于数据 $d\in D$ (D 表示某个数据组)，并产生一个解 $f(d)\in F$ (F 代表某个解集)。给定 $d\in D$，我们希望计算 $f(d)$。通常，只能够已知 d 的某个近似值 d^*，我们所能够做到的就是计算 $f(d^*)$。如果 $f(d^*)$ "逼近" $f(d)$，那么问题就是"良性"的。若 d^* 接近 d 时 $f(d^*)$ 有可能与 $f(d)$ 相差很大，我们就称问题是"病态"的。如果没有有关问题的更详细的信息，术语"逼近"就不可能准确地描述问题。

在扰动理论中，称求解 $f(d)$ 的某种算法是数值上稳定的，若它引入的对扰动的敏感

度不会比原问题本身固有的敏感度更大。稳定性可以保证稍有扰动时问题的解接近无扰动时的解。更确切地说，令 f^* 表示用于实现或近似 f 的一算法，则 f^* 是稳定的，若对所有 $d \in D$，存在一接近 d 的 $d^* \in D$ 使得 $f(d^*)$ (稍有扰动的问题的解) 接近解 $f^*(d)$。

当然，我们不可能期望一求解病态问题的稳定算法会具有比数据无扰动时更高的精确度。然而，一种不稳定的算法甚至会对良性问题给出差的结果。因此，在确定某个解的精度时，有两个不同的因素必须考虑。首先，若算法是稳定的，则 $f^*(d)$ 应该接近 $f(d^*)$；其次，若问题是良性的，则 $f(d^*)$ 应该接近 $f(d)$。这样，$f^*(d)$ 就会接近 $f(d)$。

下面讨论数值稳定性的数学描述。

在工程中，经常会遇到线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$，其中，$n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是一个元素为已知数值的系数矩阵，$n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{b}$ 为已知向量，而 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 是一个待求解的未知参数向量。系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异时，由于独立的方程个数和未知参数的个数相等，故方程具有唯一的解，称为适定方程。很自然地，我们会对这个方程的解的稳定性产生兴趣：如果系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 (或) 向量 $\boldsymbol{b}$ 发生扰动，那么方程的解向量 $\boldsymbol{x}$ 会如何变化呢？还能够保持一定的稳定性吗？研究方程的解向量 $\boldsymbol{x}$ 如何受系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和系数向量 $\boldsymbol{b}$ 的元素微小变化 (扰动) 的影响，将得到描述矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个重要特征的数值，称为条件数 (condition number)。

为了分析的方便，先假定只存在向量 $\boldsymbol{b}$ 的扰动 $\delta\boldsymbol{b}$，而矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是稳定不变的。此时，精确的解向量 $\boldsymbol{x}$ 就会扰动为 $\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x}$，即有

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x})=\boldsymbol{b}+\delta\boldsymbol{b} \tag{6.1.1}$$

这意味着

$$\delta\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{b} \tag{6.1.2}$$

因为 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$。对式 (6.1.2) 应用矩阵范数的性质，得

$$\|\delta\boldsymbol{x}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}^{-1}\|\|\delta\boldsymbol{b}\| \tag{6.1.3}$$

对线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 也使用矩阵范数的相同性质，又有

$$\|\boldsymbol{b}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{x}\| \tag{6.1.4}$$

由式 (6.1.3) 和式 (6.1.4)，立即得到

$$\frac{\|\delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}\|} \leqslant \left(\|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\|\right)\frac{\|\delta\boldsymbol{b}\|}{\|\boldsymbol{b}\|} \tag{6.1.5}$$

然后，考虑扰动 $\delta\boldsymbol{A}$ 的影响。此时，线性方程变为

$$(\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})(\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x})=\boldsymbol{b}$$

由上式可推导出

$$\begin{aligned}\delta \boldsymbol{x} &= [(\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})^{-1} - \boldsymbol{A}^{-1}]\boldsymbol{b} \\ &= \{\boldsymbol{A}^{-1}[\boldsymbol{A}-(\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})](\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})^{-1}\}\boldsymbol{b} \\ &= -\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{b} \\ &= -\boldsymbol{A}^{-1}\delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x})\end{aligned} \tag{6.1.6}$$

由此得

$$\|\delta\boldsymbol{x}\| \leqslant \|\boldsymbol{A}^{-1}\|\|\delta\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x}\|$$

即有

$$\frac{\|\delta\boldsymbol{x}\|}{\|\boldsymbol{x}+\delta\boldsymbol{x}\|} \leqslant (\|\boldsymbol{A}\|\|\boldsymbol{A}^{-1}\|)\frac{\|\delta\boldsymbol{A}\|}{\|\boldsymbol{A}\|} \tag{6.1.7}$$

式 (6.1.5) 和式 (6.1.7) 表明，解向量 $\boldsymbol{x}$ 的相对误差与数值

$$\text{cond}(\boldsymbol{A}) = \|\boldsymbol{A}\| \cdot \|\boldsymbol{A}^{-1}\| \tag{6.1.8}$$

成正比。式中，$\text{cond}(\boldsymbol{A})$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数，有时也用符号 $\kappa(\boldsymbol{A})$ 表示。

当系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 一个很小的扰动只引起解向量 $\boldsymbol{x}$ 很小的扰动时，就称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是“良态”矩阵 (well-conditioned matrix)。若系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 一个很小的扰动会引起解向量 $\boldsymbol{x}$ 很大的扰动，则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是“病态”矩阵 (ill-conditioned matrix)。条件数刻画了求解线性方程时，误差经过矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的传播扩大为解向量的误差的程度，因此是衡量线性方程数值稳定性的一个重要指标。

进一步地，我们来分析误差在线性最小二乘问题中对解的影响。考虑超定的线性方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的求解，与前面的适定方程 (即方程的个数与未知数个数相同的方程) 不同，这里 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m \times n$ 矩阵，且 $m > n$。由于方程个数多于未知参数个数，这类方程统称超定方程。超定方程存在唯一的线性最小二乘解，由

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} \tag{6.1.9}$$

即 $\boldsymbol{x} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}b$ 给出。容易证明 (详见后面的 6.2.2 小节)

$$\text{cond}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}) = [\text{cond}(\boldsymbol{A})]^2 \tag{6.1.10}$$

由式 (6.1.5) 和式 (6.1.7) 可知，$\boldsymbol{b}$ 的误差 $\delta\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的误差 $\delta\boldsymbol{A}$ 对超定方程式 (6.1.9) 的解 $\boldsymbol{x}$ 的误差的影响分别与 $\boldsymbol{A}$ 的条件数的平方成正比。就是说，超定方程 (6.1.9) 的条件数将呈平方关系增大。例如，考虑

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{bmatrix}$$

的情况，其中，δ 很小。$\boldsymbol{A}$ 的条件数为 $\delta\boldsymbol{A}^{-1}$ 数量级。由于

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1+\delta^2 & 1 \\ 1 & 1+\delta^2 \end{bmatrix}$$

因而条件数变为 δ^{-2} 数量级。

另外一方面，如果我们利用 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解来解超定方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的话，那么由于 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}$，所以

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{Q})=1 \tag{6.1.11}$$

$$\mathrm{cond}(\boldsymbol{A})=\mathrm{cond}(\boldsymbol{AQ})=\mathrm{cond}(\boldsymbol{A}) \tag{6.1.12}$$

此时，$\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的误差的影响将分别如式 (6.1.5) 和式 (6.1.7) 所示，与 $\boldsymbol{A}$ 的条件数成正比。

以上事实告诉我们，求解超定方程问题的 QR 分解方法具有比最小二乘方法更好的数值稳定性 (更小的条件数)。

若条件数“很大”，线性方程问题便称为 (相对于范数 $\|\cdot\|$) 病态的。此时，对于一接近真实 $\boldsymbol{b}$ 的 $\boldsymbol{b}^*$，由于条件数很大，所以与 $\boldsymbol{b}^*$ 对应的解就会远离对应于 $\boldsymbol{b}$ 的解。解决这类病态问题的一种比 QR 分解更加有效的方法是总体最小二乘法 (将在第 7 章介绍)，它的基础就是下一节要讨论的矩阵的奇异值分解。事实上，正如以后几节将看到的那样，矩阵的奇异值分解已被广泛应用于解决工程学科中的许多重要问题。

6.2 奇异值分解

奇异值分解 (singular value decomposition, SVD) 是现代数值分析 (尤其是数值计算) 的最基本和最重要的工具之一。本节介绍奇异值分解的定义、几何解释以及奇异值的性质。

6.2.1 奇异值分解及其解释

奇异值分解最早是由 Beltrami 在 1873 年对实正方矩阵提出来的 [38]。Beltrami 从双线性函数

$$f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{y},\quad \boldsymbol{A}\in R^{n\times n}$$

出发，通过引入线性变换

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\xi},\qquad \boldsymbol{y}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\eta}$$

将双线性函数变为

$$f(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})=\boldsymbol{\xi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{\eta}$$

式中

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} \tag{6.2.1}$$

Beltrami 观测到，如果约束 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，则它们的选择各存在 n^2-n 个自由度。他提出利用这些自由度使矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的对角线以外的元素全部为零，即矩阵 $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_n)$ 为对角矩阵。于是，用 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$ 分别左乘和右乘式 (6.2.1)，并利用 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 的正交性，立即得到

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{6.2.2}$$

这就是 Beltrami 于 1873 年得到的实正方矩阵的奇异值分解 [38]。1874 年，Jordan 也独立地推导出了实正方矩阵的奇异值分解 [241]。有关奇异值分解的这段发明历史，可参见 MacDuffee 的书 [294,p.78] 或 Stewart 的评述论文 [433]。文献 [433] 还详细地评述了奇异值分解的整个早期历史。

后来，Autonne [22] 于 1902 年把奇异值分解推广到复正方矩阵；Eckart 与 Young [141] 于 1939 年又进一步把它推广到一般的长方形矩阵。因此，现在常将任意复长方矩阵的奇异值分解定理称为 Autonee-Eckart-Young 定理，详见下述。

定理 6.2.1 (矩阵的奇异值分解)　令 $\boldsymbol{A} \in R^{m\times n}$(或 $C^{m\times n}$)，则存在正交 (或酉) 矩阵 $\boldsymbol{U} \in R^{m\times m}$(或 $C^{m\times m}$) 和 $\boldsymbol{V} \in R^{n\times n}$(或 $C^{n\times n}$) 使得

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{T}} \ (\text{或}\boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}}) \tag{6.2.3}$$

式中

$$\boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \tag{6.2.4}$$

且 $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r)$，其对角元素按照顺序

$$\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0, \qquad r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) \tag{6.2.5}$$

排列。

以上定理最早是 Eckart 与 Young [141] 于 1939 年证明的，但证明较繁杂。下面采用的是 Klema 与 Laub [256] 的比较简单的证明。

证明　因为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A} \geqslant 0$，所以 $\sigma(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}) \subseteq [0, +\infty)$。记 $\sigma(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}) = \{\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_n^2\}$，并将它们的顺序安排成 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > 0 = \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n$。令 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n$ 是对应的正交特征向量组，而且

$$\boldsymbol{V}_1 = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_r] \tag{6.2.6}$$

$$\boldsymbol{V}_2 = [\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n] \tag{6.2.7}$$

于是，若 $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r)$，则有 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}_1^2$，由此得到

$$\boldsymbol{\Sigma}_1^{-1}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}_1^{-1} = \boldsymbol{I} \tag{6.2.8}$$

另有 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 = \boldsymbol{V}_2 \times \boldsymbol{O}$ 使得 $\boldsymbol{V}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 = \boldsymbol{O}$，因此 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 = \boldsymbol{O}$。令 $\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{\Sigma}_1^{-1}$，则由式 (6.2.8)，我们有 $\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{I}$。选择任意一 $\boldsymbol{U}_2$，使得 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2]$ 正交。于是

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 & \boldsymbol{U}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 \\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_1 & \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_1\Sigma_1 & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Sigma_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} = \boldsymbol{\Sigma}$$

从而得到所希望的结果 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{T}}$。 ■

数值 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r$ 连同 $\sigma_{r+1} = \sigma_{r+2} = \cdots = \sigma_n = 0$ 一起称作矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值。

定义 6.2.1　矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的奇异值 σ_i 称为单奇异值，若 $\sigma_i \neq \sigma_j$，$\forall\, j \neq i$。

下面是关于奇异值和奇异值分解的几点解释和标记。

(1) $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{V}$ 为酉矩阵，用 $\boldsymbol{V}$ 右乘式 (6.2.3)，得 $\boldsymbol{AV} = \boldsymbol{U\Sigma}$，其列向量形式为

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i = \begin{cases} \sigma_i \boldsymbol{u}_i, & i = 1, 2, \cdots, r \\ 0, & i = r+1, r+2, \cdots, n \end{cases} \tag{6.2.9}$$

因此，$\boldsymbol{V}$ 的列向量 $\boldsymbol{v}_i$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的右奇异向量 (right singular vector)，$\boldsymbol{V}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的右奇异向量矩阵 (right singular vector matrix)。

(2) $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{U}$ 是酉矩阵，用 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 左乘式 (6.2.3)，得 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{\Sigma V}$，其列向量形式为

$$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \begin{cases} \sigma_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}, & i = 1, 2, \cdots, r \\ 0, & i = r+1, r+2, \cdots, n \end{cases} \tag{6.2.10}$$

因此，$\boldsymbol{U}$ 的列向量 $\boldsymbol{u}_i$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左奇异向量 (left singular vector)，并称 $\boldsymbol{U}$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的左奇异向量矩阵 (left singular vector matrix)。

(3) 用 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}$ 左乘式 (6.2.9)，并注意到 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i = 1$，易得

$$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i = \sigma_i, \quad i = 1, 2, \cdots, \min\{m, n\} \tag{6.2.11}$$

或用矩阵形式写成

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\Sigma}_1 = \begin{bmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \sigma_n \end{bmatrix} \tag{6.2.12}$$

式 (6.2.3) 和式 (6.2.11) 是矩阵奇异值分解的两种定义方式。事实上，式 (6.2.3) 很容易由式 (6.2.11) 导出。由于 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 分别是 $m \times m$ 和 $n \times n$ 酉矩阵，满足 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_m$ 和 $\boldsymbol{V}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_n$，所以在式 (6.2.11) 两边左乘 $\boldsymbol{U}$ 和右乘 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$ 后，立即得式 (6.2.3)。这也可以看作是定理 6.2.1 的另一种推导。

(4) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解式 (6.2.3) 可以改写成向量表达形式：

$$\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}} \tag{6.2.13}$$

这种表达有时称为 $\boldsymbol{A}$ 的并向量 (奇异值) 分解 (dyadic decomposition) [184]。

(5) 由式 (6.2.3) 易得

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.14}$$

这表明，$m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值 σ_i 是矩阵乘积 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的特征值 (这些特征值是非负的) 的正平方根。

(6) 当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩 $r = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) < \min\{m, n\}$ 时，由于奇异值 $\sigma_{r+1} = \sigma_{r+2} = \cdots = \sigma_h = 0$，$h = \min\{m, n\}$，故奇异值分解公式 (6.2.3) 可以简化为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_r \boldsymbol{\Sigma}_r \boldsymbol{V}_r^{\mathrm{H}} \tag{6.2.15}$$

式中

$$U_r = [u_1, u_2, \cdots, u_r], \quad V_r = [v_1, v_2, \cdots, v_r], \quad \Sigma_r = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r)$$

式 (6.2.15) 称为矩阵 A 的截尾奇异值分解 (truncated SVD) 或薄奇异值分解 (thin SVD)。与之形成对照，式 (6.2.3) 则称为全奇异值分解 (full SVD)。

(7) 如果矩阵 $A_{m\times n}$ 具有秩 r，则

① $m \times m$ 酉矩阵 U 的前 r 列组成矩阵 A 的列空间的标准正交基。

② $n \times n$ 酉矩阵 V 的前 r 列组成矩阵 A 的行空间 (或 A^{H} 的列空间) 的标准正交基。

③ V 的后 $n-r$ 列组成矩阵 A 的零空间的标准正交基。

④ U 的后 $m-r$ 列组成矩阵 A^{H} 的零空间的标准正交基。

顾名思义，矩阵 A 的奇异值应该能够描述 A 的奇异性质。下面的定理从数学上严格地叙述了这一事实。

定理 6.2.2 [184] 令 $A \in C^{m\times n}$ $(m > n)$ 的奇异值为

$$\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_n \geqslant 0$$

则

$$\sigma_k = \min_{E \in C^{m\times n}} \{\|E\|_{\text{F}} : \text{rank}(A+E) \leqslant k-1\}, \qquad k = 1, 2, \cdots, n \tag{6.2.16}$$

并且存在一满足 $\|E_k\|_{\text{F}} = \sigma_k$ 的误差矩阵 E 使得

$$\text{rank}(A + E_k) = k - 1, \qquad k = 1, 2, \cdots, n$$

定理 6.2.2 表明，奇异值与使得原矩阵 A 的秩减小 1 的误差矩阵 E_k 的 Frobenius 范数相等。如果原 $n \times n$ 矩阵 A 是正方的，并且具有一个零奇异值，则定理 6.2.2 表明，该矩阵的秩减小 1 的误差矩阵 E 的 Frobenius 范数等于零。这意味着，误差矩阵必然是一个零矩阵。换句话说，根据定理 6.2.2，当原 $n \times n$ 矩阵 A 有一个零奇异值时，该矩阵的秩 $\text{rank}(A) \leqslant n-1$，即原矩阵 A 本来就不是满秩的。因此，如果一个正方矩阵具有零奇异值，则该矩阵必定是奇异矩阵。从这个角度讲，零奇异值刻画了矩阵 A 的奇异性质。一个正方矩阵只要有一个奇异值接近零，那么这个矩阵就接近于奇异矩阵。推而广之，一个非正方的矩阵如果有奇异值为零，则说明这个长方矩阵一定不是列满秩的或者行满秩的。这种情况称为矩阵的秩亏缺，它相对于矩阵的满秩是一种奇异现象。总之，无论是正方还是长方矩阵，零奇异值都刻画矩阵的奇异性。这就是矩阵奇异值的内在涵义。

下面以矩阵方程 (6.1.2) 的求解为例，考查奇异值分解的几何意义。

首先，我们可以把

$$\tilde{x} = V^{\text{H}} x \qquad \text{或} \qquad x = V\tilde{x} \tag{6.2.17}$$

看作是利用 V 进行的一种正交变换 (也可认为是一种旋转)，将 x 的各点旋转为 $\tilde{x}$ 的各点。同样地，我们也可以利用 U^{H} 对 b 作正交变换：

$$\tilde{b} = U^{\text{H}} b \tag{6.2.18}$$

即将 $\boldsymbol{b}$ 的各点旋转一定角度后变为 $\tilde{\boldsymbol{b}}$ 上的各点。现在，将奇异值分解式 (6.2.3) 代入式 (6.1.2)，并利用式 (6.2.17) 和式 (6.2.18)，可得到

$$\tilde{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{\Sigma}\tilde{\boldsymbol{x}} \longrightarrow \tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\tilde{\boldsymbol{b}}$$

于是，线性方程组 (6.1.2) 的求解过程可以解释为一系列的线性变换操作，即

$$\boldsymbol{b} \xrightarrow{\boldsymbol{U}} \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} = \tilde{\boldsymbol{b}} \xrightarrow{\boldsymbol{\Sigma}} \boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\tilde{\boldsymbol{b}} = \tilde{\boldsymbol{x}} \xrightarrow{\boldsymbol{V}} \boldsymbol{V}\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{x}$$

注意，$\boldsymbol{\Sigma}$ 的广义逆矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}$ 可直接计算为

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}^{-1} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \tag{6.2.19}$$

其中

$$\boldsymbol{\Sigma}^{-1} = \mathrm{diag}(1/\sigma_1, 1/\sigma_2, \cdots, 1/\sigma_r) \tag{6.2.20}$$

把 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 视作从 n 维 (复数) 向量空间 C^n 到 m 维 (复数) 向量空间 C^m 的线性映射有时是很方便的。此时，关于奇异值分解的唯一性，有以下结果 [518]。

(1) 非零奇异值的个数 r 和它们的值 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r$ 相对于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是唯一确定的。

(2) 若 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = r$，则满足 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的 $\boldsymbol{x}(\in C^n)$ 的集合即 $\boldsymbol{A}$ 的零空间 Null $\boldsymbol{A}(\subseteq C^n)$ 是 $n-r$ 维的，因此可选择正交基 $\{\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n\}$ 作为 $\boldsymbol{A}$ 在 C^n 内的零空间。从这个意义上讲，$\boldsymbol{V}$ 的列向量张成的 C^n 的子空间 Null($\boldsymbol{A}$) 是唯一确定的，但是各个向量只要能组成该子空间的正交基，它们就可以自由地选择。

(3) 可以表示成 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的 $\boldsymbol{y}(\in C^m)$ 的集合组成 $\boldsymbol{A}$ 的像空间 Im$\boldsymbol{A}$，它是 r 维的，而 Im$\boldsymbol{A}$ 的正交补空间 $(\mathrm{Im}\boldsymbol{A})^{\perp}$ 是 $m-r$ 维的，因此可选择 $\{\boldsymbol{u}_{r+1}, \boldsymbol{u}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$ 作为 Im$\boldsymbol{A}$ 在 C^m 内的正交补空间内的正交基。由 $\boldsymbol{U}$ 的列向量 $\boldsymbol{u}_{r+1}, \boldsymbol{u}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{u}_m$ 张成的 C^m 的子空间 $(\mathrm{Im}\boldsymbol{A})^{\perp}$ 是唯一确定的。

(4) 若 σ_i 是单奇异值 (即 $\sigma_i \neq \sigma_j$, $\forall\, j \neq i$)，则 $\boldsymbol{v}_i$ 和 $\boldsymbol{u}_i$ 除相差一相角 ($\boldsymbol{A}$ 为实数矩阵时，相差一符号) 外是唯一确定的。也就是说，$\boldsymbol{v}_i$ 和 $\boldsymbol{u}_i$ 同时乘以 $\mathrm{e}^{\mathrm{j}\theta}$ ($\mathrm{j} = \sqrt{-1}$，且 θ 为实数) 后，它们仍然分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的右和左奇异向量。

6.2.2 奇异值的性质

下面分几种情况，分别详细讨论奇异值的各种性质。为统一计，令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 $m \times n$ 矩阵，并且 $r_A = \mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$，$p = \min\{m, n\}$。

设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值排列为

$$\sigma_{\max} = \sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_{p-1} \geqslant \sigma_p = \sigma_{\min} \geqslant 0 \tag{6.2.21}$$

并且用 $\sigma_i(\boldsymbol{B})$ 表示矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的第 i 个大奇异值。

矩阵的各种变形与奇异值的变化有以下关系。

(1) $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的共轭转置 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.22}$$

即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 具有完全相同的奇异值。

(2) $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{Q}$ 分别为 $m \times m$ 和 $n \times n$ 酉矩阵时，$\boldsymbol{PAQ}^{\mathrm{H}}$ 的奇异值分解由

$$\boldsymbol{PAQ}^{\mathrm{H}} = \tilde{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{\Sigma}\tilde{\boldsymbol{V}}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.23}$$

给出，其中，$\tilde{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{PU}$，$\tilde{\boldsymbol{V}} = \boldsymbol{QV}$。就是说，矩阵 $\boldsymbol{PAQ}^{\mathrm{H}}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的奇异值，即奇异值具有酉不变性，但奇异向量不同。

(3) $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的奇异值分解分别为

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}, \qquad \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.24}$$

其中

$$\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_r^2, \overbrace{0, \cdots, 0}^{n-r\text{个}}) \tag{6.2.25}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}} = \mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_r^2, \overbrace{0, \cdots, 0}^{m-r\text{个}}) \tag{6.2.26}$$

注：$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 均为 Hermitian 矩阵。Hermitian 矩阵的奇异值分解与特征值分解是一致的。

(4) $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解与 $n \times m$ 维 Moore-Penrose 广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 之间存在下列关系：

$$\boldsymbol{A}^{\dagger} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.27}$$

其中，$\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}$ 由式 (6.2.19) 给定。

证明 前三个性质显然。为了证明性质 (4)，令 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$。于是，有

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{AGA} &= (\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}) \\
&= \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A} \\
\boldsymbol{GAG} &= (\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}})(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}) \\
&= \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{G} \\
\boldsymbol{AG} &= \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{AG})^{\mathrm{H}} \\
\boldsymbol{GA} &= \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{GA})^{\mathrm{H}}
\end{aligned}$$

即 $\boldsymbol{G}$ 满足 Moore-Penrose 广义逆矩阵的定义。因此，$\boldsymbol{G}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 广义逆矩阵，即性质 (4) 成立。 ■

虽然 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 相对于 $\boldsymbol{A}$ 不是唯一确定的，但广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 是唯一确定的。特别地，若 $\boldsymbol{A}$ 是一个正方的非奇异矩阵，则 $\boldsymbol{A}^{\dagger} = \boldsymbol{A}^{-1}$。因此，在这一情况下，如果 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值是 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n$，那么 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的奇异值就是 $1/\sigma_1, 1/\sigma_2, \cdots, 1/\sigma_n$。

关于矩阵和它的子矩阵的奇异值之间的关系，有下面的定理，常被称为奇异值交织定理 (interlacing theorem for singular values)。

定理 6.2.3[225, Eq. (3.1.3)],[233] 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，其奇异值 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r$，其中，$r=\min\{m,n\}$。若 $p\times q$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的子矩阵，其奇异值 $\gamma_1 \geqslant \gamma_2 \geqslant \cdots \geqslant \gamma_{\min\{p,q\}}$，则

$$\sigma_i \geqslant \gamma_i, \quad i=1,2,\cdots,\min\{p,q\} \tag{6.2.28}$$

并且

$$\gamma_i \geqslant \sigma_{i+(m-p)+(n-q)}, \quad i \leqslant \min\{p+q-m, p+q-n\} \tag{6.2.29}$$

矩阵的奇异值与矩阵的范数、行列式、条件数、特征值等有着密切的关系。

1. 奇异值与范数的关系

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱范数等于 $\boldsymbol{A}$ 的最大奇异值，即

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\text{spec}} = \sigma_1 \tag{6.2.30}$$

根据矩阵的奇异值分解定理，并注意到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Frobenius 范数 $\|\boldsymbol{A}\|_{\text{F}}$ 是酉不变的，即 $\|\boldsymbol{U}^{\text{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}\|_{\text{F}} = \|\boldsymbol{A}\|_{\text{F}}$，故有

$$\|\boldsymbol{A}\|_{\text{F}} = \left[\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2\right]^{1/2} \tag{6.2.31}$$

$$= \|\boldsymbol{U}^{\text{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V}\|_{\text{F}} = \|\boldsymbol{\Sigma}\|_{\text{F}}$$

$$= \sqrt{\sigma_1^2+\sigma_2^2+\cdots+\sigma_r^2} \tag{6.2.32}$$

即是说，任何一个矩阵的 Frobenius 范数等于该矩阵所有非零奇异值平方和的正平方根。

考虑矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩 k 近似，并将其记作 $\boldsymbol{A}_k$，其中，$k<r=\text{rank}(\boldsymbol{A})$。矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 定义如下：

$$\boldsymbol{A}_k = \sum_{i=1}^{k}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\text{H}}, \qquad k<r$$

则 $\boldsymbol{A}$ 与秩为 k 的任一矩阵 $\boldsymbol{B}$ 之差的 l_1 和 Frobineus 范数分别为

$$\min_{\text{rank}(\boldsymbol{B})=k}\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_1 = \|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_k\|_1 = \sigma_{k+1} \tag{6.2.33}$$

和

$$\min_{\text{rank}(\boldsymbol{B})=k}\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_{\text{F}}^2 = \|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_k\|_{\text{F}}^2 = \sigma_{k+1}^2+\sigma_{k+2}^2+\cdots+\sigma_r^2 \tag{6.2.34}$$

这一重要结果是许多概念和应用的基础。例如，总体最小二乘、数据压缩、图像增强、动态系统实现理论，以及线性方程的求解等问题都需要用一个低秩矩阵近似 $\boldsymbol{A}$。

2. 奇异值与行列式的关系

设 $\boldsymbol{A}$ 是 $n\times n$ 正方矩阵。由于酉矩阵的行列式之绝对值等于 1，所以由定理 6.2.1 有

$$|\det(\boldsymbol{A})| = |\det \boldsymbol{\Sigma}| = \sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_n \tag{6.2.35}$$

若所有 σ_i 都不等于零，则 $|\det(\boldsymbol{A})|\neq 0$，这表明 $\boldsymbol{A}$ 是非奇异的。如果至少有一个 $\sigma_i(i>r)$ 等于零，便有 $\det(\boldsymbol{A})=0$，即 $\boldsymbol{A}$ 是奇异的。这就是之所以把全部 σ_i 值统称为奇异值的原因。综合式 (6.2.34) 和式 (6.2.35)，对于一个 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，下列不等式成立：

$$\left.\begin{aligned}
n\sigma_1 \geqslant \|\boldsymbol{A}\|_{\rm F} \geqslant \sigma_1 \\
\sigma_1^n \geqslant \sigma_1^{n-1}\sigma_n \geqslant |\det(\boldsymbol{A})| \geqslant \sigma_n^n \\
\|\boldsymbol{A}\|_{\rm F} \geqslant \sigma_1 \geqslant |\det(\boldsymbol{A})|^{1/n} \\
|\det(\boldsymbol{A})|^{1/n} \geqslant \sigma_n \geqslant |\det(\boldsymbol{A})|/\|\boldsymbol{A}\|_{\rm F}^{n-1} \\
\|\boldsymbol{A}\|_{\rm F}^n/|\det(\boldsymbol{A})| \geqslant \sigma_1/\sigma_n \geqslant \max\left\{1, \frac{1}{n}\|\boldsymbol{A}\|_{\rm F}/|\det(\boldsymbol{A})|^{1/n}\right\}
\end{aligned}\right\} \tag{6.2.36}$$

这些不等式虽然是粗略的评价，但有时是有用的。

3. 奇异值与条件数的关系

对于一个 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，其条件数也可以利用奇异值定义为

$$\text{cond}(\boldsymbol{A}) = \sigma_1/\sigma_p, \qquad p=\min\{m,n\} \tag{6.2.37}$$

由定义式 (6.2.37) 可以看出，条件数是一个大于或等于 1 的正数，因为 $\sigma_1\geqslant\sigma_p$。显然，由于至少有一个奇异值 $\sigma_p=0$，故奇异矩阵的条件数为无穷大，而条件数虽然不是无穷大，但却很大时，就称 $\boldsymbol{A}$ 是接近奇异的。这意味着，当条件数很大时，$\boldsymbol{A}$ 的行向量或列向量的线性相关性很强。另由定义式 (6.1.8) 易知，正交或酉矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的条件数等于 1。从这个意义上讲，正交或酉矩阵是"理想条件"的。式 (6.2.37) 也可用作条件数 $\text{cond}(\boldsymbol{A})$ 的评价。

考虑超定方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$。此时，由于 $\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^2\boldsymbol{V}^{\rm H} \tag{6.2.38}$$

即矩阵 $\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}$ 的最大和最小奇异值分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最大和最小奇异值的平方，故

$$\text{cond}(\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}) = \frac{\sigma_1^2}{\sigma_n^2} = [\text{cond}(\boldsymbol{A})]^2 \tag{6.2.39}$$

换言之，矩阵 $\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}$ 的条件数是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数的平方倍。

4. 奇异值与特征值的关系

设 $n\times n$ 正方对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ ($|\lambda_1|\geqslant|\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant|\lambda_n|$)，奇异值为 $\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_n$ ($\sigma_1\geqslant\sigma_2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_n\geqslant 0$)，则 $\sigma_1\geqslant|\lambda_i|\geqslant\sigma_n\ (i=1,2,\cdots,n)$，$\text{cond}(\boldsymbol{A})\geqslant|\lambda_1|/|\lambda_n|$。

特别值得指出的是，奇异值分解提供了在实际信号处理中发生的一些重要问题的定量答案。

问题 1：一矩阵与低秩矩阵是如何接近的？

答案：如果 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}$ 具有奇异值

$$\sigma_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_r > \sigma_{r+1} = \cdots = \sigma_n = 0$$

则 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = r$，且

$$\min_{\text{rank}(\boldsymbol{B})\leqslant r} \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}\|_{\text{F}}^2 = \sigma_{r+1}^2$$

特别地，若 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}$ 非奇异，则 σ_n 是到奇异矩阵集合的距离。因此，$1/\text{cond}(\boldsymbol{A}) = \sigma_n/\sigma_1 = \sigma_n/\|\boldsymbol{A}\|_{\text{F}}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 接近奇异的相对测度。

问题 2: 一矩阵的值域与零空间是什么？

答案：如果 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m]$ 和 $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_n]$ 分别是左和右奇异向量矩阵的列分块，并且 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = r$，则 $\text{Null}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n\}$，$\text{Range}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_r\}$。即是说，一矩阵的值域是与非零奇异值对应的奇异向量张成的子空间，而零空间则是与零奇异值对应的奇异向量张成的子空间。

问题 3: 怎样度量 C^n 中两个 k 维子空间是否接近？

答案：假定 $n \times k$ 矩阵 $\boldsymbol{Y} = [\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_k]$ 和 $\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \cdots, \boldsymbol{z}_k]$ 具有正交列，并且 $S_1 = \text{Span}(\boldsymbol{Y})$ 和 $S_2 = \text{Span}(\boldsymbol{Z})$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{Y}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 的列向量张成的子空间。若 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_k$ 是 $\boldsymbol{Y}^{\text{H}}\boldsymbol{Z}$ 的奇异值，则

$$\text{dist}(S_1, S_2) = \min_{\boldsymbol{y}\in S_1,\, \boldsymbol{z}\in S_2,\, \|\boldsymbol{z}\|_2=1} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{z}\|_2 = \sqrt{1 - \sigma_1^2}$$

上述问题答案的证明可在文献 [184] 中找到。

6.2.3 奇异值的性质汇总

为了方便读者参考，下面汇总了矩阵的奇异值的性质。

1. 奇异值服从的等式关系 [290]

(1) 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 和其复共轭转置矩阵 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 具有相同的奇异值。

(2) 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的非零奇异值是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 或者 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A}$ 的非零特征值的正平方根。

(3) $\sigma > 0$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的单奇异值，当且仅当 σ^2 是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 或 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A}$ 的单特征值。

(4) 若 $p = \min\{m, n\}$，且 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_p$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的奇异值，则

$$\text{tr}\left(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A}\right) = \sum_{i=1}^{p} \sigma_i^2$$

(5) 矩阵行列式的绝对值等于矩阵奇异值之乘积，即 $|\det(\boldsymbol{A})| = \sigma_1\sigma_2\cdots\sigma_n$。

(6) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱范数等于 $\boldsymbol{A}$ 的最大奇异值，即 $\|\boldsymbol{A}\|_{\text{spec}} = \sigma_{\max}$。

(7) 若 $m \geqslant n$，则对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$，有

$$\sigma_{\min}(\boldsymbol{A}) = \min\left\{\left(\frac{\boldsymbol{x}^{\rm H}\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\rm H}\boldsymbol{x}}\right)^{1/2} : \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}\right\}$$
$$= \min\left\{(\boldsymbol{x}^{\rm H}\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{1/2} : \boldsymbol{x}^{\rm H}\boldsymbol{x} = 1,\ \boldsymbol{x} \in C^n\right\}$$

(8) 若 $m \geqslant n$，则对于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$，有

$$\sigma_{\max}(\boldsymbol{A}) = \max\left\{\left(\frac{\boldsymbol{x}^{\rm H}\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\rm H}\boldsymbol{x}}\right)^{1/2} : \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0}\right\}$$
$$= \max\left\{(\boldsymbol{x}^{\rm H}\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^{1/2} : \boldsymbol{x}^{\rm H}\boldsymbol{x} = 1,\ \boldsymbol{x} \in C^n\right\}$$

(9) 若 $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则

$$\frac{1}{\sigma_{\min}(\boldsymbol{A})} = \max\left\{\left(\frac{\boldsymbol{x}^{\rm H}(\boldsymbol{A}^{-1})^{\rm H}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\rm H}\boldsymbol{x}}\right)^{1/2} : \boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{0},\ \boldsymbol{x} \in C^n\right\}$$

(10) 若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\rm H}$ 是 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解，则 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵

$$\boldsymbol{A}^{\dagger} = \boldsymbol{V}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_1^{-1} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{U}^{\rm H}$$

(11) 若 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_p$ 是 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的非零奇异值 (其中，$p = \min\{m, n\}$)，则矩阵 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{A}^{\rm H} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$ 具有 $2p$ 个非零奇异值 $\sigma_1, \cdots, \sigma_p, -\sigma_1, \cdots, -\sigma_p$ 和 $|m-n|$ 个零奇异值。

2. 奇异值服从的不等式关系 [224],[225],[270],[81],[290]

(1) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是 $m\times n$ 矩阵，则对于 $1 \leqslant i, j \leqslant p,\ i+j \leqslant p+1\ (p = \min\{m, n\})$，有

$$\sigma_{i+j-1}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \sigma_i(\boldsymbol{A}) + \sigma_j(\boldsymbol{B})$$

特别地，当 $j = 1$ 时，$\sigma_i(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \sigma_i(\boldsymbol{A}) + \sigma_1(\boldsymbol{B}),\ i = 1, 2, \cdots, p$ 成立。

(2) 对矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}, \boldsymbol{B}_{m\times n}$，有

$$\sigma_{\max}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \sigma_{\max}(\boldsymbol{A}) + \sigma_{\max}(\boldsymbol{B})$$

(3) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是 $m \times n$ 矩阵，则

$$\sum_{j=1}^{p}[\sigma_j(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) - \sigma_j(\boldsymbol{A})]^2 \leqslant \|\boldsymbol{B}\|_{\rm F}^2, \quad p = \min\{m, n\}$$

(4) 若 $\boldsymbol{A}_{m\times m}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_m]$ 的奇异值 $\sigma_1(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_m(\boldsymbol{A})$，则

$$\sum_{j=1}^{k}[\sigma_{m-k+j}(\boldsymbol{A})]^2\leqslant\sum_{j=1}^{k}\boldsymbol{a}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_j\leqslant\sum_{j=1}^{k}[\sigma_j(\boldsymbol{A})]^2,\quad k=1,2,\cdots,m$$

(5) 若 $p=\min\{m,n\}$，且 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{B}_{m\times n}$ 的奇异值排列为 $\sigma_1(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_p(\boldsymbol{A})$，$\sigma_1(\boldsymbol{B})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{B})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_p(\boldsymbol{B})$ 和 $\sigma_1(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_p(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})$，则

$$\sigma_{i+j-1}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}})\leqslant\sigma_i(\boldsymbol{A})\sigma_j(\boldsymbol{B}),\quad 1\leqslant i,j\leqslant p,\ i+j\leqslant p+1$$

(6) 设 $m\times(n-1)$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是删去 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 任意一列得到的矩阵，并且它们的奇异值都按照非降顺序排列，则

$$\sigma_1(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_1(\boldsymbol{B})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{B})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_h(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_h(\boldsymbol{B})\geqslant 0$$

式中，$h=\min\{m,n-1\}$。

(7) 设 $(m-1)\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是删去 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 任意一行得到的矩阵，并且它们的奇异值都按照非降顺序排列，则

$$\sigma_1(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_1(\boldsymbol{B})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_2(\boldsymbol{B})\geqslant\cdots\geqslant\sigma_h(\boldsymbol{A})\geqslant\sigma_h(\boldsymbol{B})\geqslant 0$$

式中，$h=\min\{m,n-1\}$。

(8) 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的最大奇异值满足不等式

$$\sigma_{\max}(\boldsymbol{A})\geqslant\left[\frac{1}{n}\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\right]^{1/2}$$

6.2.4 秩亏缺最小二乘解

在奇异值分析的应用中，常常需要用一个低秩的矩阵逼近一个含噪声或扰动的矩阵。下面的定理给出了逼近质量的评价。

定理 6.2.4 令 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n}$ 的奇异值分解由 $\boldsymbol{A}=\sum_{i=1}^{p}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$ 给出，其中，$p=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$。
若 $k<p$，并且 $\boldsymbol{A}_k=\sum_{i=1}^{k}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}}$，则逼近质量可分别使用谱范数和 Frobenius 范数度量：

$$\min_{\mathrm{rank}(\boldsymbol{B})=k}\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_{\mathrm{spec}}=\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_k\|_{\mathrm{spec}}=\sigma_{k+1}\tag{6.2.40}$$

$$\min_{\mathrm{rank}(\boldsymbol{B})=k}\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}\|_{\mathrm{F}}=\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{A}_k\|_{\mathrm{F}}=\sqrt{\sum_{i=k+1}^{q}\sigma_i^2}\tag{6.2.41}$$

式中，$q=\min\{m,n\}$。

证明 详见文献 [140]，[315] 或 [233]。

在信号处理和系统理论中，最常见的线性方程组 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 是超定的和非满秩即秩亏缺的，也就是说，矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}$ 的行数 m 比列数 n 大，且 $r=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})<n$。令 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解由式 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$ 给出，其中，$\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\sigma_1,\cdots,\sigma_r,0,\cdots,0)$。考察

$$\boldsymbol{G}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.42}$$

式中，$\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}=\mathrm{diag}(1/\sigma_1,\cdots,1/\sigma_r,0,\cdots,0)$。由奇异值的性质 (4) 知，$\boldsymbol{G}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 广义逆矩阵。因此，

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} \tag{6.2.43}$$

给出最小二乘最小范数解。此时，解 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 的误差矩阵由

$$\boldsymbol{\Sigma}_{\hat{\boldsymbol{x}}}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}=\boldsymbol{V}(\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma})^{\dagger}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{6.2.44}$$

给出。式 (6.2.43) 可表示为

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}=\sum_{i=1}^{r}(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}/\sigma_i)\boldsymbol{v}_i$$

它是最小二乘问题

$$\min\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\|_2 \tag{6.2.45}$$

的最小范数解，相应的最小残差为

$$\rho_{\mathrm{LS}}=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}-\boldsymbol{b}\|_2=\|[\boldsymbol{u}_{r+1},\cdots,\boldsymbol{u}_m]^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}\|_2 \tag{6.2.46}$$

应用奇异值分解求解最小二乘问题的方法常简称为奇异值分解方法。虽然在理论上，当 $i>r$ 时奇异值 $\sigma_i=0$，但是计算出来的奇异值 $\hat{\sigma}_i$，$i>r$ 并不会等于零，有时甚至表现出比较大的扰动。因此，需要有计算秩 r 的估计值 $\hat{r}$ 的方法。在信号处理和系统理论中，常将该估计值称为"有效秩"。

有效秩确定有以下两种常用方法。

1. *归一化奇异值方法*

计算归一化奇异值

$$\bar{\sigma}_i=\frac{\hat{\sigma}_i}{\hat{\sigma}_1} \tag{6.2.47}$$

选择满足准则

$$\bar{\sigma}_i\geqslant\epsilon \tag{6.2.48}$$

的最大整数作为有效秩的估计值 $\hat{r}$。显然，这一准则等价于选择满足

$$\hat{\sigma}_i\geqslant\epsilon\cdot\hat{\sigma}_1 \tag{6.2.49}$$

的最大整数 $\hat{r}$。式中，ϵ 是某个很小的正数，它根据计算机精度与 (或) 数据精度选取。例如，选取 $\epsilon=0.1$ 或者 $\epsilon=0.05$ 等。

2. 范数比方法

令 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 是原 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩 k 近似，定义该近似矩阵与原矩阵的 Frobenius 范数比为

$$\nu(k) = \frac{\|\boldsymbol{A}_k\|_{\mathrm{F}}}{\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}} = \frac{\sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_k^2}}{\sqrt{\sigma_1^2 + \sigma_2^2 + \cdots + \sigma_h^2}}, \qquad h = \min\{m, n\} \tag{6.2.50}$$

并选择满足

$$\nu(k) \geqslant \alpha \tag{6.2.51}$$

的最大整数作为有效秩估计 $\hat{r}$，其中，α 是接近于 1 的阈值，例如 $\alpha = 0.997$ 等。

采用以上两种准则确定出有效秩 $\hat{r}$ 后，可将

$$\hat{\boldsymbol{x}}_{\mathrm{LS}} = \sum_{i=1}^{\hat{r}} (\hat{\boldsymbol{u}}_i^{\mathrm{H}} \boldsymbol{b} / \hat{\sigma}_i) \hat{\boldsymbol{v}}_i \tag{6.2.52}$$

看作是真实最小二乘解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 的一个合理近似。显而易见，这种解就是方程组 $\boldsymbol{A}_{\hat{r}} \boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 的最小二乘解，其中

$$\boldsymbol{A}_{\hat{r}} = \sum_{i=1}^{\hat{r}} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}} \tag{6.2.53}$$

在最小二乘问题中，用 $\boldsymbol{A}_{\hat{r}}$ 代替 $\boldsymbol{A}$ 相当于过滤掉小的奇异值。当 $\boldsymbol{A}$ 是从有噪声的观测数据得到时，这种过滤能够起很大的作用。容易观察出，式 (6.2.52) 给出的最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{x}}_{\mathrm{LS}}$ 仍然包含了 n 个参数。然而，由于线性方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ 秩亏缺意味着 $\boldsymbol{x}$ 中只有 r 个参数是独立的，其他参数是这 r 个独立参数的重复作用或线性相关的结果。在许多应用中，当然希望能够求出这 r 个线性无关的参数，而不是包含了冗余因素的 n 个参数。换言之，我们的目的是只估计主要因素，并剔除掉次要因素。在线性代数中，这相当于如何从矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 列中挑选出 r 个线性无关的列来。怎样挑选这些线性无关的列称为子集选择问题。

在秩亏缺的情况下，利用 SVD 进行子集选择是必要的。Golub 等人曾提出过一种基于 SVD 的子集选择方法 [183]。

算法 6.2.1 (子集选择算法)

步骤 1　计算 $\boldsymbol{A}$ 的 SVD，并确定 $\boldsymbol{A}$ 的有效秩 $\hat{r}$。

步骤 2　计算置换矩阵 $\boldsymbol{P}$，使得在 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = [\boldsymbol{B}_1, \boldsymbol{B}_2]$ 中的矩阵 $\boldsymbol{B}_1 \in C^{m \times \hat{r}}$ 的列是“足够线性无关的”。

步骤 3　将 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的 LS 问题变换为求 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix} = \boldsymbol{b}$ 的 LS 解 $\boldsymbol{z} \in C^{\hat{r}}$，即求 $\|\boldsymbol{B}_1 \boldsymbol{z} - \boldsymbol{b}\|_2$ 的极小化变量 $\boldsymbol{z}$。

由于

$$\min_{\boldsymbol{z} \in C^{\hat{r}}} \|\boldsymbol{B}_1 \boldsymbol{z} - \boldsymbol{b}\|_2 \geqslant \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$$

所以置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 应选得使残差 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{B}_1^{\dagger})\boldsymbol{b}$ 的范数尽可能小。但是，这有可能产生不稳定的解。例如，对于

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 0\\ 1 & 1+\epsilon & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\ -1\\ 0\end{bmatrix}$$

若取 $\hat{r}=2$ 和 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{I}$，则 $\min\|\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{z}-\boldsymbol{b}\|_2=0$，但 $\|\boldsymbol{B}_1^{\dagger}\boldsymbol{b}\|_2=O(1/\epsilon)$，即 LS 解 $\boldsymbol{z}=\boldsymbol{B}_1^{\dagger}\boldsymbol{b}$ 不稳定。这个例子说明，应该在选择列的线性无关性和它给出的残差范数 (即解的稳定性) 之间取折衷。考虑到这些因素，Golub 等人利用基于 SVD 的子集选择，提出了求方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 中 $\boldsymbol{x}$ 的独立参数的最小二乘解的下述实际算法 [183]，称之为低秩 LS 方法。

算法 6.2.2 (低秩 LS 方法) 给定 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n},\boldsymbol{b}\in R^m$，本算法计算

$$\boldsymbol{x}=\arg\min_{\boldsymbol{z}}\left\|\boldsymbol{AP}\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix}-\boldsymbol{b}\right\|_2$$

步骤 1 计算 SVD 即 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AV}=\mathrm{diag}(\sigma_1,\cdots,\sigma_n)$，确定有效秩 $\hat{r}$，并根据 $\hat{r}$ 将 $\boldsymbol{V}$ 分块为

$$\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}_{11} & \boldsymbol{V}_{12}\\ \boldsymbol{V}_{21} & \boldsymbol{V}_{22}\end{bmatrix}$$

其中，$\boldsymbol{V}_{11}\in R^{\hat{r}\times\hat{r}}$，然后存储 $\boldsymbol{V}_{11}$ 和 $\boldsymbol{V}_{21}$。

步骤 2 利用列主元 QR 算法 (算法 6.2.3) 计算 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}[\boldsymbol{V}_{11}^{\mathrm{T}},\ \boldsymbol{V}_{21}^{\mathrm{T}}]\boldsymbol{P}=[\boldsymbol{R}_{11},\boldsymbol{R}_{12}]$，然后计算 $\boldsymbol{AP}=[\boldsymbol{B}_1,\ \boldsymbol{B}_2]$，其中，$\boldsymbol{B}_1\in R^{m\times\hat{r}}$。

步骤 3 计算 $\boldsymbol{z}=(\boldsymbol{B}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_1)^{-1}\boldsymbol{B}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$。

下面是步骤 2 用到的列主元 QR 算法。

算法 6.2.3 (列主元 QR 分解) [184] 给定矩阵 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n}$，其中，$m\geqslant n$。下面的算法计算 $r=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$ 和列主元 QR 分解

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AP}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_{11} & \boldsymbol{R}_{12}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$$

其中，$\boldsymbol{R}_{11}\in R^{r\times r}$ 是上三角的非奇异矩阵。作为输出结果，$\boldsymbol{A}$ 的上三角部分存放 $\boldsymbol{R}$ 的上三角部分，置换矩阵 $\boldsymbol{P}$ 用整数向量 piv 编码 (若 piv 的第 j 个元素等于整数 m，则 $\boldsymbol{P}$ 的第 j 列仅第 m 个元素为 1，而其他元素皆为零)。

for $j=1,2,\cdots,n$

  $c(j)=A(1:m,j)^{\mathrm{T}}A(1:m,j)$

end

$r=0;\tau=\max\{c(j),\cdots,c(n)\}$

求满足 $c(k)=\tau$ 的最小整数 $k\,(1\leqslant k\leqslant n)$

while $\tau>0$

  $r=r+1$

  $piv(r)=k;\ A(1:m,r)\leftrightarrow A(1:m,k);\ c(r)\leftrightarrow c(k)$

  $v(r:m)=\mathrm{house}(A(r:m,r))$

  $A(r:m,r:n)=\mathrm{row.house}(\boldsymbol{A}(r:m,r:n),v(r:m))$

$A(r+1:m,r)=v(r+1:m)$

for $i=r+1:n$

  $c(i)=c(i)-A(r,i)^2$

end

if $r<n$

  $\tau=\max\{c(r+1),\cdots,c(n)\}$

  求满足 $c(k)=\tau$ 的最小整数 $k\,(r+1\leqslant k\leqslant n)$

else

$\tau=0$

end

end

例 6.2.1 [184] 假定

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}3&4&-1\\7&4&-3\\2&5&3\\-1&4&5\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\1\\1\\1\end{bmatrix}$$

得到 $\text{rank}(\boldsymbol{A})=2$ 和

$$\boldsymbol{x}_{\text{LS}}=\begin{bmatrix}0.0815\\0.1545\\0.0730\end{bmatrix}$$

应用算法 6.2.2，则得到

$$\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{x}=\begin{bmatrix}0.0845\\0.2275\\0.0000\end{bmatrix}$$

顺便指出，$\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{\text{LS}}\|_2\approx\|\boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\|_2=0.1966$。

有必要指出，上述最小二乘解只考虑了线性方程一边的误差，它的数值性能比不上同时考虑方程两边误差的总体最小二乘方法 (详见第 7 章)。与低秩最小二乘方法一样，也有低秩总体最小二乘方法，但是它们的子集选择方法明显不同。

6.3 奇异值分解的数值计算

前面介绍了奇异值分解的定义、性质及求解线性方程的奇异值分解方法。本节讨论奇异值分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\text{T}}$ 的数值计算：给定矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$，如何用尽可能高的精度计算其奇异值，右奇异向量矩阵 $\boldsymbol{V}_{n\times n}$ 与 (或) 左奇异向量矩阵 $\boldsymbol{U}_{m\times m}$。

求解一般矩阵的奇异值问题的最常用算法可以分为两大类：

(1) QR 分解

(2) Jacobi 旋转

6.3.1 奇异值分解的 QR 分解算法

这类算法通常分两个阶段进行：第一阶段为矩阵的二重对角化，即应用 Householder 变换将矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 变换为二重对角矩阵 (除主对角线及其上面一条对角线的元素外，其他元素全为零)。第二阶段为 QR 分解，即保持二重对角矩阵的形式不变，利用正交变换使上一条对角线的元素逐渐减小，使矩阵接近对角矩阵。此时，需要具体构造正交矩阵 $\boldsymbol{V}$，但 $\boldsymbol{U}$ 可以不予保留。

应用 Householder 变换进行二重对角化又分为两个步骤：第一步使 $\boldsymbol{A}$ 的第 1 列除 $(1,1)$ 元素以外的其他元素全部变换为零；尔后，对除 $(1,1)$ 元素以外的第 1 行再作 Householder 变换，以便使 $(1,2)$ 元素以右的其他元素全部变换为零。第二步对除去第 1 行和第 1 列后剩下的其余部分进行与第一步类似的 Householder 变换，使得 $(1,2)$ 和 $(2,2)$ 以外的第 2 列元素和 $(2,2)$ 和 $(2,3)$ 以外的第 2 行元素全部变换为零。如此重复，直到经过 $(2n-2)$ 次 Householder 变换，实现矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的二重对角化，如图 6.3.1 所示。与此同时，对每行进行的 Householder 变换也同时对 $\boldsymbol{V}$ 进行，其中，$\boldsymbol{V}$ 的初始值设为单位矩阵 $\boldsymbol{I}$。

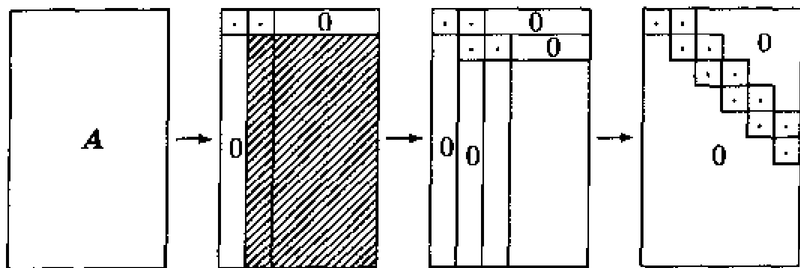


图6.3.1 利用Householder变换进行二重对角化

将对角元素记作 q_i，上对角元素记作 e_i (定义 $e_1=0$)，并舍去二重对角矩阵下面的零元素，从而剩下一个 $n\times n$ 的正方矩阵 $\boldsymbol{G}$。

在第二阶段即 QR 分解阶段，对 $\boldsymbol{G}$ 应用 QR 方法进行对角化，即反复应用正交变换，使上对角元素逐渐减小。利用 Givens 旋转矩阵 $\boldsymbol{T}_2$ 右乘矩阵 $\boldsymbol{G}$ 时，$\boldsymbol{G}$ 的第 1,2 列将发生变化，原先为零的 $(2,1)$ 元素会变为非零值。由于它是多余出来的，所以要用 Givens 矩阵 $\boldsymbol{S}_2^{\mathrm{T}}$ 左乘，以使 $(2,1)$ 元素变作零。但是，由于 $\boldsymbol{G}_2^{\mathrm{T}}$ 是左乘，第 1,2 行将发生变化，原来等于零的 $(1,3)$ 元素又会有非零值。然后，为了消去 $(1,3)$ 元素，我们又需要右乘 Givens 矩阵 $\boldsymbol{T}_3$。这样一来，又会产生非零的 $(3,2)$ 元素。重复这样的 Givens 旋转过程，最后为了消去 $(n,n-1)$ 元素而左乘 $\boldsymbol{S}_n^{\mathrm{T}}$。由于没有 $(n+1)$ 列存在，所以最后仍然能够得到一个二重对角矩阵。上述过程称作追赶 (chasing) 过程。图 6.3.2 示出了追赶法消零的顺序。

在实际计算时，将矩阵 $\boldsymbol{G}$ 分块成尽可能小的二重对角矩阵可以加快追赶过程的收敛。因此，在利用 Givens 旋转进行追赶前，首先应分析全部的 q_i 和 e_i，检查一下是否有等于零的元素。例如，如果 $e_i=0$，则可以将 $\boldsymbol{G}$ 分块成两个独立的二重对角矩阵，即有

$$\boldsymbol{G}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{G}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{G}_2\end{bmatrix}$$

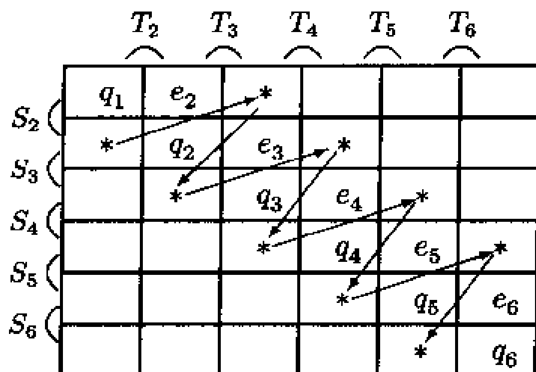


图6.3.2 追赶法消零的顺序

这样，即可对 G_1 和 G_2 分别进行独立的对角化。

需要强调的是，计算矩阵 A 的奇异值分解时，如果先通过正交变换把它变成三角矩阵形式，那么奇异值分解的数值稳定性通常将增加 [75]。

6.3.2 奇异值分解的精确计算

在应用计算机进行奇异值分解的数值运算时，通常使用浮点运算。令 $fl(\cdot)$ 表示某种运算的浮点计算结果，则有 [123]

$$\left.\begin{aligned} fl(a\pm b)&=a(1+\varepsilon_1)+b(1+\varepsilon_2)\\ fl(a\times b)&=(a\times b)\times(1+\varepsilon_3)\\ fl(a/b)&=(a/b)(1+\varepsilon_4)\\ fl(\sqrt{2})&=\sqrt{2}(1+\varepsilon_5)\end{aligned}\right\}\tag{6.3.1}$$

式中，$|\varepsilon_i|\leqslant\varepsilon$，并且 $\varepsilon\ll 1$ 代表计算机精度。

由于初始矩阵 A 的元素往往是通过观测或者计算得到的，而观测数据或者计算不可避免地存在一定的误差，因此初始矩阵元素本身存在小的相对不确定度。显然，即使对这样的矩阵使用完全精确的奇异值分解计算方法，所得到的奇异值和奇异向量元素也存在固有的不确定度。若使用某种方法计算得到的奇异值和奇异向量元素的误差界接近它们固有的不确定度，则称这种方法是求解奇异值问题的精确算法，并称这种算法得到的奇异值和奇异向量的计算结果是精确的。基于这一考虑，Demmel 与 Veselic 于 1992 年提出了一种在一般矩阵 $A_{m\times n}$ 的右边使用单边 Jacobi 旋转 (称为右边 Jacobi 旋转) 的浮点运算，求解奇异值问题的下列算法 [123]。

算法 6.3.1 (奇异值分解的右边 Jacobi 算法) 令 tol 是用户自定义的迭代计算停止准则，且 V 的初始值设为单位矩阵。下面的算法计算矩阵 $A_{m\times n}$ 的奇异值和右奇异向量矩阵 V。

for all pairs $i<j$

计算矩阵 $A^{\mathrm{T}}A$ 的 (i,j) 子矩阵 $\begin{bmatrix} a & c\\ c & b\end{bmatrix}$：

$$a = \sum_{k=1}^{n} A_{ki}^2$$
$$b = \sum_{k=1}^{n} A_{kj}^2$$
$$c = \sum_{k=1}^{n} A_{ki} * A_{kj}$$

计算使子矩阵 $\begin{bmatrix} a & c \\ c & b \end{bmatrix}$ 对角化的右边 Jacobi 旋转矩阵 $\begin{bmatrix} cs & -sn \\ sn & cs \end{bmatrix}$:

$\xi = (b-a)/(2c)$; $t = \text{sgn}(\xi)/(|\xi| + \sqrt{1+\xi^2})$

$cs = 1/\sqrt{1+t^2}$; $sn = cs \star t$

更新 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 列和第 j 列:

for $k = 1:n$

$tmp = A_{ki}$

$A_{ki} = cs * tmp - sn * A_{kj}$

$A_{kj} = sn * tmp + cs * A_{kj}$

endfor

更新右奇异向量的矩阵 $\boldsymbol{V}$:

for $k = 1:n$

$tmp = V_{ki}$

$V_{ki} = cs * tmp - sn * V_{kj}$

$V_{kj} = sn * tmp + cs * V_{kj}$

endfor

endfor

重复以上计算步骤，直到收敛。迭代计算的停止准则是：对所有 $i < j$ 的子矩阵，均有 $|c|/\sqrt{ab} \leqslant \text{tol}$。

上述算法的结果如下：

(1) 最后得到的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 各列的范数给出奇异值的计算结果。

(2) 矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的各列给出与上述奇异值对应的右奇异向量。

(3) 更新后的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的各列给出与上述奇异值对应的左奇异向量。

注意，虽然我们在第 4 章按照大多数文献的叫法，将 Jacobi 旋转和 Givens 旋转当作完全相同的旋转，但是上述算法中的 Jacobi 旋转确实与 Givens 旋转不同。其不同点在于参数 cs 和 sn 的计算不一样。

6.4 乘积奇异值分解

上一节介绍了一般矩阵的奇异值分解。从本节开始，将依次讨论几种特殊情况下矩阵的奇异值分解，它们分别是乘积奇异值分解、广义奇异值分解和结构奇异值分解。本

节介绍乘积奇异值分解的有关理论和实现算法。

6.4.1 乘积奇异值分解问题

所谓乘积奇异值分解 (product singular value decomposition, PSVD)，顾名思义就是两个矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解。考虑矩阵乘积

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C},\quad \boldsymbol{B}\in R^{p\times m},\ \boldsymbol{C}\in R^{p\times n},\ \mathrm{rank}(\boldsymbol{B})=\mathrm{rank}(\boldsymbol{C})=p \tag{6.4.1}$$

从原理上讲，乘积奇异值分解等价于直接对矩阵的乘积进行普通的奇异值分解。然而，事先直接计算矩阵的乘积，再计算矩阵乘积的奇异值分解往往会让小的奇异值产生大的扰动。为了说明这一点，请看一个例子。

例 6.4.1[134] 令

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}1 & \xi\\ -1 & \xi\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{C}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & 1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1-\xi & 1+\xi\\ -1-\xi & -1+\xi\end{bmatrix} \tag{6.4.2}$$

显然，$\boldsymbol{C}$ 是一个正交矩阵，而 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$ 的两列 $[1,-1]^{\mathrm{T}}$ 和 $[\xi,\xi]^{\mathrm{T}}$ 相互正交。矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的真实奇异值为 $\sigma_1=\sqrt{2}$ 和 $\sigma_2=\sqrt{2}|\xi|$。然而，若 $|\xi|$ 小于截止误差 ε，式 (6.4.2) 的浮点计算结果为 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}1 & 1\\ -1 & -1\end{bmatrix}$，其奇异值为 $\sigma_1=\sqrt{2}$ 和 $\sigma_2=0$。若 $|\xi|>1/\varepsilon$，则浮点运算得到的矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}-\xi & \xi\\ -\xi & \xi\end{bmatrix}$，其奇异值为 $\sigma_1=0$ 和 $\sigma_2=\sqrt{2}|\xi|$。因此，矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的两个实际的奇异值 $\sigma_1=\sqrt{2}$ 和 $\sigma_2=\sqrt{2}|\xi|$ 在经过浮点算法计算后，最小的奇异值被扰动为 0，与实际的奇异值相差明显。Laub 等人 [273] 指出，当线性系统接近不可控和不可观测时，小奇异值的精确计算显得十分重要，因为如果一个非零的小奇异值被计算为零值，则会导致错误的结论，即将一个最小系统判断为非最小系统。

上述例子说明，直接对两个矩阵的乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 进行奇异值分解在数值上是不可取的。因此，有必要考虑一个更加困难的问题：能否使得计算式 (6.4.1) 中 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解尽可能与给定的 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 具有接近的精度？这就是所谓的 (矩阵) 乘积奇异值分解问题。

乘积奇异值分解是由 Fernando 与 Hammarling 于 1988 年首先提出来的 [153]，它可以用下面的定理来表述。

定理 6.4.1 (乘积奇异值分解) [153] 令 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\in C^{m\times p}$，$\boldsymbol{C}\in C^{p\times n}$，则存在酉矩阵 $\boldsymbol{U}\in C^{m\times m},\boldsymbol{V}\in C^{n\times n}$ 和非奇异矩阵 $\boldsymbol{Q}\in C^{p\times p}$ 使得

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I} & & \\ & \boldsymbol{O}_B & \\ & & \boldsymbol{\Sigma}_B\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{Q}^{-1}\boldsymbol{C}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}_C & & \\ & \boldsymbol{I} & \\ & & \boldsymbol{\Sigma}_C\end{bmatrix} \tag{6.4.3}$$

式中

$$\boldsymbol{\Sigma}_B=\mathrm{diag}(s_1,s_2,\cdots,s_r),\qquad 1>s_1\geqslant\cdots\geqslant s_r>0$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_C=\mathrm{diag}(t_1,t_2,\cdots,t_r),\qquad 1>t_1\geqslant\cdots\geqslant t_r>0$$

且

$$s_i^2 + t_i^2 = 1, \qquad i = 1, 2, \cdots, r$$

有关本定理的证明，可参见文献 [153]，但在 6.6 节 (约束奇异值分解) 中，将介绍一种更简单的证明方法。根据定理 6.4.1，不难验证

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = \mathrm{diag}(\boldsymbol{O}_C, \boldsymbol{O}_B, \boldsymbol{\Sigma}_B\boldsymbol{\Sigma}_C)$$

因此，矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值由零奇异值和非零奇异值两部分组成，其非零奇异值由 $s_i t_i, i = 1, 2, \cdots, r$ 给出。

6.4.2 乘积奇异值分解的三角型 Kogbetliantz 算法

定理 6.4.1 给出了乘积奇异值分解的严格形式。值得指出的是，在文献 [153] 给出这种严格定义之前，已由 Heath 等人 [208] 于 1986 年提出了矩阵乘积奇异值分解的一种松散形式，而且 Heath 等人的方法直接给出了一种计算乘积奇异值的实际算法。

给定一个 $p\times m$ 实矩阵 $\boldsymbol{B}$ 和一个 $p\times n$ 实矩阵 $\boldsymbol{C}$，并假定它们都具有满秩 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{B}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{C}) = p < \min\{m, n\}$。即是说，矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 有 p 个非零奇异值，其余 $\min\{m,n\}-p$ 个奇异值全部为零。令

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{Q}_B \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_B \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{C} = [\boldsymbol{R}_C, \boldsymbol{O}]\boldsymbol{Q}_C \tag{6.4.4}$$

式中，$\boldsymbol{Q}_B, \boldsymbol{Q}_C$ 同为正交矩阵，且 $\boldsymbol{R}_B, \boldsymbol{R}_C$ 均为上三角矩阵。于是，矩阵乘积

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C} = \boldsymbol{Q}_B \begin{bmatrix} \boldsymbol{R}_B\boldsymbol{R}_C & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \boldsymbol{Q}_C \tag{6.4.5}$$

上式表明，矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的 p 个非零奇异值与两个上三角矩阵的乘积 $\boldsymbol{R}_B\boldsymbol{R}_C$ 的 p 个非零奇异值相同。

由于矩阵变换为三角矩阵之后，能够提高奇异值分解的数值性能 [75]，所以计算 $\boldsymbol{R}_B\boldsymbol{R}_C$ 的非零奇异值具有比直接计算 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值更好的数值性能，使得 $\boldsymbol{R}_B\boldsymbol{R}_C$ 的非零奇异值具有与给定的 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 接近的精度。

Kogbetliantz 算法 [259] 是计算任意正方矩阵奇异值分解的一种最常用的有效方法。这种算法的基本思想是将 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解问题转化为一系列 2×2 矩阵的奇异值分解，也就是用一个迭代的循环序列计算 $n\times n$ 正方矩阵的奇异值分解。以 $n=4$ 为例，在序列循环法的每一步，计算以对角线为中心的 2×2 矩阵的奇异值分解以消去对角线以外的矩阵元素，循环的顺序如下：

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 & 2 & 3 \\ 1 & 0 & 4 & 5 \\ 2 & 4 & 0 & 6 \\ 3 & 5 & 6 & 0 \end{bmatrix} \tag{6.4.6}$$

称之为行排序，当然也有列排序。式中，标 1 的元素第一个被消去，标 2 的元素第二个被消去，如此等等。需要注意的是，在消去标 2 的元素时，原先已消去的标 1 元素可能会重

新出现非零值。更一般地，在消去标 $k(\geqslant 2)$ 的元素时，原消去的标 $(k-1)$ 元素有可能重新出现非零值。当然，对角线上的元素 (标 0) 不被消去。上述算法可以保证原矩阵 $\boldsymbol{A}$ 收敛为对角矩阵形式。实际中发现，算法至少是二次收敛的。

对于一个三角矩阵 $\boldsymbol{A}_1$，Kogbetliantz 算法将它变换为下三角矩阵 $\boldsymbol{A}_2$。再次对 $\boldsymbol{A}_2$ 运用 Kogbetliantz 算法，又将下三角矩阵变换成上三角矩阵 $\boldsymbol{A}_3$。因此，随着迭代的进行，矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 在上三角和下三角形式之间来回变换。而且，在每一循环中，只有一个矩阵元素被 2×2 奇异值分解消去。以 4×4 上三角矩阵为例，循环顺序如图 6.4.1 所示。

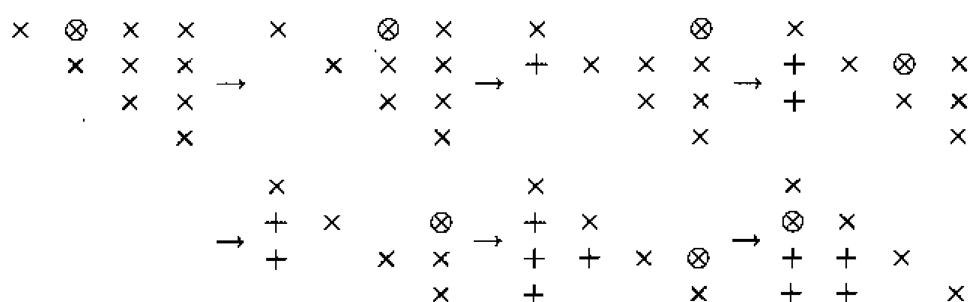


图 6.4.1 利用一次扫零将上三角矩阵变换为下三角矩阵

图 6.4.1 中，原来的非零元素用 $\times$ 标注，新产生的非零元素用 $+$ 表示，而标有 $\otimes$ 的元素则是下一步需要消去的。这样，经过一次扫零，就得到了下三角形式。下一次扫零使用完全相同的顺序，并再一次产生上三角矩阵。

计算乘积奇异值分解的上述方法是 Heath 等人提出的 [208]。通过观察这一方法，可以得出以下结果：

(1) 这种算法理论上等价于对矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 应用 Kogbertlianta 算法，所以每一步矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的非对角线元素理论上都是减小的，并且最终将收敛为零值。

(2) 每一步只涉及 $\boldsymbol{B}_k$ 的两列和 $\boldsymbol{C}_k$ 的两列被读取或被修正。

(3) 每一步只计算 $\boldsymbol{A}_k$ 的四个元素。这四个元素的两个总是位于对角线上，它们可以从前一步知道。因此，如果利用对 $a_{ii}^{(k+1)}$ 和 $a_{jj}^{(k+1)}$ 的了解，$(1,2)$ 元素的化简需要计算 4 次向量内积，但是对 $(1,3),\cdots,(1,n)$ 各元素的化简却只需要计算 3 次向量内积，而对剩下元素的化简只计算 2 次向量内积。

(4) 当 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{C}$ 时，上述方法实质上就变成了计算 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}$ 奇异值分解的算法 (只需要单边的 Jacobi 方法)。这种“单边”奇异值分解方法是 Hestenes 于 1958 年提出的 [216]。因此，Heath 等人采用双边 Kogbetliantz 算法的“双边”奇异值分解方法可以看作是 Hestenes 单边奇异值分解方法的拓广。

概而言之，Heath 等人的算法理论上等价于对 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 使用 Kogbertliantz 三角型奇异值分解算法。Kogbertliantz 算法使用 QR 分解，将 $\boldsymbol{B}_k^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{C}_k$ 分别变换为三角矩阵形式，并且在迭代过程中，通过使用平面旋转，能够保持两个矩阵的三角形状。迭代阶段的收敛有可能慢，尤其是当存在多重奇异值，或者奇异值的大小比较接近时，收敛为对角

矩阵的过程更慢。Heath 等人通过数值计算证明，上述算法具有比直接计算 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解更好的精确度。

然而，在某些情况下，Heath 等人的算法会产生与直接计算 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解相类似的误差。以最小二乘问题中的法方程为例。

例 6.4.2[273],[47],[134] 令

$$\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}0 & \xi\\ 1 & 1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{C}=\boldsymbol{B},\quad \boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ \xi & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & \xi\\ 1 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1+\xi^2\end{bmatrix}$$

其真实奇异值为 $\sigma_1=|\xi|/\sqrt{2}$ 和 $\sigma_2=\sqrt{2+0.5\xi^2}$。显然，若 $|\xi|>\varepsilon$，但 $|\xi|^2<\varepsilon$，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的浮点近似 $\tilde{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}1 & 1\\ 1 & 1\end{bmatrix}$。由于 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 同为上三角矩阵，使用 Heath 等人的算法计算的奇异值将与直接计算 $\tilde{\boldsymbol{A}}$ 的奇异值相同，为 $\hat{\sigma}_1=0$ 和 $\hat{\sigma}_2=\sqrt{2}$。显然，小的奇异值的计算结果 $\hat{\sigma}_1=0$ 与真实的奇异值 $\sigma_1=|\xi|/\sqrt{2}$ 存在较大的误差。

6.4.3 乘积奇异值分解的精确计算

为了克服 Heath 等人的算法的这一缺点，Drmac 于 1998 年提出了乘积奇异值分解的精确计算算法 [134]，其基本思路如下：任何一个矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与正交矩阵相乘，其奇异值保持不变。因此，若令

$$\boldsymbol{B}'=\boldsymbol{TBU},\qquad \boldsymbol{C}'=(\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{CV}\tag{6.4.7}$$

其中，$\boldsymbol{T}$ 非奇异，$\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}$ 为正交矩阵，则 $\boldsymbol{B}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}'=\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{CV}$ 与 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 具有完全相同的奇异值 (包括零奇异值在内)，并且很容易由 $\boldsymbol{B}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}'$ 的奇异值分解得到 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解，因为

$$\boldsymbol{B}'^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}'=\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{T}^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{CV}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C})\boldsymbol{V}$$

给定矩阵 $\boldsymbol{B}\in R^{p\times m},\boldsymbol{C}\in R^{p\times n}$，$p\leqslant\min\{m,n\}$，并记矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行向量为 $\boldsymbol{b}_i^{\tau}$，$i=1,2,\cdots,p$。Drmac 的乘积奇异值分解算法如下。

算法 6.4.1 (乘积奇异值分解 PSVD(B, C))[134]

步骤 1 计算 $\boldsymbol{B}_\tau=\mathrm{diag}(\|\boldsymbol{b}_1^{\tau}\|_2,\|\boldsymbol{b}_2^{\tau}\|_2,\cdots,\|\boldsymbol{b}_p^{\tau}\|_2)$，令 $\boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{B}_\tau^{\dagger}\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}_1=\boldsymbol{B}_\tau\boldsymbol{C}$。

步骤 2 利用算法 4.7.1 (列旋转的 Householder QR 分解算法) 计算 $\boldsymbol{C}_1^{\mathrm{T}}$ 的 QR 分解，即

$$\boldsymbol{C}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Pi}=\boldsymbol{Q}\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}_{(n-r)\times p}\end{bmatrix}$$

其中，$\boldsymbol{R}\in R^{r\times p}$, $\mathrm{rank}(\boldsymbol{R})=r$；$\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵。

步骤 3 利用标准矩阵乘法计算矩阵 $\boldsymbol{F}=\boldsymbol{B}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Pi}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}$。

步骤 4 计算矩阵 $\boldsymbol{F}$ 的 QR 分解 (最好使用列旋转的 Householder QR 分解算法)：

$$\boldsymbol{F}\boldsymbol{\Pi}_F=\boldsymbol{Q}_F\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}_F\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$$

步骤 5 对转置矩阵 $\boldsymbol{R}_F^{\mathrm{T}}$ 应用奇异值分解的右边 Jacobi 算法 (算法 5.3.1)，计算 $\boldsymbol{R}_F$ 的奇异值分解 $\boldsymbol{\Sigma}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_F\boldsymbol{W}$。

输出 矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解结果为

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}\oplus\boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} & \\ & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\boldsymbol{Q}_F^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\right)\left[\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{W}\oplus\boldsymbol{I}_{n-p})\right]$$

式中，$\boldsymbol{A}\oplus\boldsymbol{D}$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{D}$ 的直和。

在上述算法中，对角矩阵 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_p)$ 的广义逆矩阵 $\boldsymbol{D}^{\dagger}$ 仍然为对角矩阵，其对角元素为 $1/d_i$ $(d_i\neq 0)$ 或 0 $(d_i=0)$。

计算矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解的上述算法已被推广到三个矩阵乘积的奇异值分解的精确计算 [136]。令

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{C} \tag{6.4.8}$$

式中，$\boldsymbol{B}\in R^{p\times m}$, $\boldsymbol{S}\in R^{p\times q}$, $\boldsymbol{C}\in R^{q\times n}$, $p\leqslant m$, $q\leqslant n$。

假定正则条件

$$\mathrm{rank}(\boldsymbol{B})=p,\ \mathrm{rank}(\boldsymbol{C})=q,\ \mathrm{rank}(\boldsymbol{S})=\rho=\min\{p,q\} \tag{6.4.9}$$

满足这一正则条件的三个矩阵 $(\boldsymbol{B},\boldsymbol{S},\boldsymbol{C})$ 称为正则矩阵三元组 (regular matrix triplet)[136]。在这种情况下，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 将有 $\min\{m,n\}-\rho=\min\{m,n\}-\min\{p,q\}$ 个确定的零奇异值。现在的问题是，用尽可能高的相对精度计算其他非零奇异值。

下面是 Drmac 于 2000 年提出的两种算法 [136]。

算法 6.4.2 (三矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解 PSVD(B, S, C))[136]

输入 $\boldsymbol{B}\in R^{p\times m}$, $\boldsymbol{S}\in R^{p\times q}$, $\boldsymbol{C}\in R^{q\times n}$, $p\leqslant m$, $q\leqslant n$

步骤 1 计算 $\boldsymbol{B}_\tau=\mathrm{diag}(\|\boldsymbol{b}_1^{\mathrm{T}}\|_2,\|\boldsymbol{b}_2^{\mathrm{T}}\|_2,\cdots,\|\boldsymbol{b}_p^{\mathrm{T}}\|_2),\boldsymbol{C}_\tau=\mathrm{diag}(\|\boldsymbol{c}_1^{\mathrm{T}}\|_2,\|\boldsymbol{c}_2^{\mathrm{T}}\|_2,\cdots,\|\boldsymbol{c}_c^{\mathrm{T}}\|_2)$，其中，$\boldsymbol{b}_i^{\mathrm{T}}(i=1,2,\cdots,p)$ 和 $\boldsymbol{c}_j^{\mathrm{T}}(j=1,2,\cdots,q)$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 的行向量。然后，令 $\boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{B}_\tau^{\dagger}\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}_1=\boldsymbol{C}_\tau^{\dagger}\boldsymbol{C},\boldsymbol{S}_1=\boldsymbol{B}_\tau\boldsymbol{S}\boldsymbol{C}_\tau$。

步骤 2 利用行和列旋转计算矩阵 $\boldsymbol{S}_1$ 的 LU 分解：

$$\boldsymbol{\Pi}_1\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{\Pi}_2=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U}$$

式中

$$\boldsymbol{L}\in R^{p\times p},\ \boldsymbol{U}\in R^{p\times q},\quad \rho=\mathrm{rank}(\boldsymbol{L})=\mathrm{rank}(\boldsymbol{U}),\ L_{ii}=1,\ 1\leqslant i\leqslant\rho$$

步骤 3 利用标准的矩阵乘法运算计算

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Pi}_1\boldsymbol{B}_1,\qquad \boldsymbol{N}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Pi}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}_1$$

应用算法 6.4.1 直接得到 $\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}$ 的奇异值分解。

输出 三矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解为

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}\oplus\boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} & \\ & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\boldsymbol{Q}_F^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}\boldsymbol{C}\right)\left(\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{W}\oplus\boldsymbol{I}_{n-p})\right)$$

式中，$\boldsymbol{Q},\boldsymbol{Q}_F,\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 为在步骤 3 中使用算法 6.4.1 得到的结果。

算法 6.4.3 (三矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解 PSVD(B, S^{-1}, C))[136]

输入　$\boldsymbol{B}\in R^{p\times m}$, $\boldsymbol{S}\in R^{p\times p}$, $\boldsymbol{C}\in R^{p\times n}$, $\mathrm{rank}(\boldsymbol{S})=p$

步骤 1　计算

$$\boldsymbol{B}_\tau=\mathrm{diag}(\|\boldsymbol{b}_1^\tau\|_2,\|\boldsymbol{b}_2^\tau\|_2,\cdots,\|\boldsymbol{b}_p^\tau\|_2)$$
$$\boldsymbol{C}_\tau=\mathrm{diag}(\|\boldsymbol{c}_1^\tau\|_2,\|\boldsymbol{c}_2^\tau\|_2,\cdots,\|\boldsymbol{c}_c^\tau\|_2)$$

其中，$\boldsymbol{b}_i^\tau(i=1,2,\cdots,p)$ 和 $\boldsymbol{c}_j^\tau(j=1,2,\cdots,q)$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 的行向量。然后，令 $\boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{B}_\tau^{-1}\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}_1=\boldsymbol{C}_\tau^{-1}\boldsymbol{C},\boldsymbol{S}_1=\boldsymbol{C}_\tau^{-1}\boldsymbol{S}\boldsymbol{B}_\tau^{-1}$。

步骤 2　利用行和列旋转计算矩阵 $\boldsymbol{S}_1$ 的 LU 分解：

$$\boldsymbol{\Pi}_1\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{\Pi}_2=\boldsymbol{L}\boldsymbol{U},\qquad L_{ii}=1,\ 1\leqslant i\leqslant p$$

步骤 3　利用标准的矩阵乘法运算计算

$$\boldsymbol{M}=\boldsymbol{U}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{\Pi}_2\boldsymbol{B}_1,\qquad \boldsymbol{N}=\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{\Pi}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}_1$$

应用算法 6.4.1 直接得到 $\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{N}$ 的奇异值分解。

输出　三矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解为

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}\oplus\boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} & \\ & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\boldsymbol{Q}_F^{\mathrm{T}}\left(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{C}\right)\left(\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{W}\oplus\boldsymbol{I}_{n-p})\right)$$

式中，$\boldsymbol{Q},\boldsymbol{Q}_F,\boldsymbol{V}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 为在步骤 3 中使用算法 6.4.1 得到的结果。

6.5　广义奇异值分解

6.2 节介绍了矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解。矩阵的奇异值分解已有多种推广形式，6.4 节的矩阵乘积的奇异值分解只是其中之一。从这节起，我们将讨论其他形式的奇异值分解，它们是矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的奇异值分解 (称为广义奇异值分解)，矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的奇异值分解 (约束奇异值分解)，结构奇异值分解和 Takagi 奇异值分解。由于奇异值分解有多种推广，所以有些文献把矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解称为普通奇异值分解 (ordinary SVD, OSVD)。本节先讨论广义奇异值分解 (generalized SVD, GSVD)，其他几种推广的奇异值分解则留待 6.6 节再介绍。

6.5.1　对称正定问题

在广义特征值问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$ 中，满足广义特征值 - 特征向量方程

$$\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$$

的标量 λ 和非零向量 $\boldsymbol{x}$ 分别称为矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值和广义特征向量。求解广义特征值问题 $\boldsymbol{Ax}=\lambda\boldsymbol{Bx}$ 的方法之一是下面的全等变换：

$$\begin{array}{ccc} \boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B} & & (\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX})-\lambda(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{BX}) \\ & \Longleftrightarrow & \\ \text{对称 - 正定} & & \text{对称 - 正定} \end{array}$$

并且希望寻求一种稳定的有效算法，它计算的 $\boldsymbol{X}$ 能使得 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AX}$ 和 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{BX}$ 二者都是"标准型"的。最简单的标准型就是对角矩阵。

定理 6.5.1 假定 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 为 $n\times n$ 对称矩阵，并定义

$$\boldsymbol{C}(\mu)=\mu\boldsymbol{A}+(1-\mu)\boldsymbol{B},\qquad \mu\in R \tag{6.5.1}$$

若存在 $\mu\in[0,1]$ 使得 $\boldsymbol{C}(\mu)$ 是非负定的，并且

$$\mathrm{Null}(\boldsymbol{C}(\mu))=\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})\cap\mathrm{Null}(\boldsymbol{B}) \tag{6.5.2}$$

则存在一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 使得 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AQ}$ 和 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{BQ}$ 二者都是对角形式的。

证明 选择 $\mu\in[0,1]$ 使 $C(\mu)$ 非负定，并具有性质 (6.5.2) 式。设

$$\boldsymbol{Q}_0^{\mathrm{T}}C(\mu)\boldsymbol{Q}_0=\begin{bmatrix}\boldsymbol{D} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_k),\quad d_i>0$$

是 $\boldsymbol{C}(\mu)$ 的 Schur 分解，并定义 $\boldsymbol{Q}_1=\boldsymbol{Q}_0\mathrm{diag}(D^{-1/2},I_{n-k})$。如果 $\boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AQ}_1$，$\boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{BQ}_1$ 和 $\boldsymbol{C}_1=\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}C(\mu)\boldsymbol{Q}_1$，则

$$\boldsymbol{C}_1=\begin{bmatrix}I_k & 0\\ 0 & 0\end{bmatrix}=\mu\boldsymbol{A}_1+(1-\mu)\boldsymbol{B}_1$$

由于 $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{e}_{k+1},\boldsymbol{e}_{k+2},\cdots,\boldsymbol{e}_n\}=\mathrm{Null}(\boldsymbol{C}_1)=\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}_1)\cap\mathrm{Null}(\boldsymbol{B}_1)$，故知 $\boldsymbol{A}_1$ 和 $\boldsymbol{B}_1$ 具有以下结构：

$$\boldsymbol{A}_1=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_{11} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{B}_1=\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}_{11} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$$

其中，$\boldsymbol{A}_{11}$ 和 $\boldsymbol{B}_{11}$ 均是 $k\times k$ 方阵，且 $\boldsymbol{I}_k=\mu\boldsymbol{A}_{11}+(1-\mu)\boldsymbol{B}_{11}$。

假定 $\mu\neq 0$。于是，若 $\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_{11}\boldsymbol{Z}=\mathrm{diag}(b_1,b_2,\cdots,b_k)$ 是 $\boldsymbol{B}_{11}$ 的 Schur 分解，则可通过令 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{Q}_1\mathrm{diag}(\boldsymbol{Z},\boldsymbol{I}_{n-k})$，得到

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{BQ}=\mathrm{diag}(b_1,\cdots,b_k,0,\cdots,0)\equiv\boldsymbol{D}_B$$

和

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AQ}=\frac{1}{\mu}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}[C(\mu)-(1-\mu)\boldsymbol{B}]\boldsymbol{Q}=\frac{1}{\mu}\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_k & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}-(1-\mu)\boldsymbol{D}_B\right)\equiv\boldsymbol{D}_A$$

另外一方面，若 $\mu=0$，则令 $\boldsymbol{Z}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_{11}\boldsymbol{Z}=\mathrm{diag}(a_1,a_2,\cdots,a_k)$ 是 $\boldsymbol{A}_{11}$ 的 Schur 分解，并令 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{Q}_1\mathrm{diag}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{I}_{n-k})$。容易验证，在这种情况下，矩阵 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AQ}$ 和 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{BQ}$ 二者也都是对角的。 ■

对于对称－正定的矩阵束，上述定理给出下面的结果。

推论 6.5.1 若 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B}$ 是对称－正定的，则存在一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{Q}=[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_n]$ 使得

$$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}=\mathrm{diag}(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n),\qquad \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Q}=\mathrm{diag}(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_n)$$

且 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_i=\lambda_i\boldsymbol{B}\boldsymbol{q}_i, i=1,2,\cdots,n$，其中，$\lambda_i=\alpha_i/\beta_i$ 为广义特征值。

证明 在定理 6.5.1 中令 $\mu=0$ 后立即知，对称－正定矩阵束可以同时对角化。推论的其他部分很容易建立。 ■

6.5.2 广义奇异值分解

上一小节的对称－正定问题实际上又可以写作 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}$ 的形式，其中，$\boldsymbol{A}\in R^{m\times n}$，$\boldsymbol{B}\in R^{p\times n}$。注意，由定理 6.5.1 知，存在一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{Q}\in R^{n\times n}$ 使得 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})\boldsymbol{Q}$ 二者都是对角的。因此，无需事先计算 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}$，就有可能直接由 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 求出广义特征值 λ。这就是所谓的广义奇异值分解 (GSVD) 方法，它是 Van Loan 于 1976 年最早提出来 [462]。

定理 6.5.2 (广义奇异值分解 1) [462] 若 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}, m\geqslant n$ 和 $\boldsymbol{B}\in C^{p\times n}$，则存在酉矩阵 $\boldsymbol{U}\in C^{m\times m}$ 和 $\boldsymbol{V}\in C^{p\times p}$ 以及非奇异矩阵 $\boldsymbol{Q}\in C^{n\times n}$，使得

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}=[\underset{k}{\boldsymbol{\Sigma}_A}\quad \underset{n-k}{\boldsymbol{O}}],\qquad \boldsymbol{\Sigma}_A=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_r & & \\ & \boldsymbol{S}_A & \\ & & \boldsymbol{O}_A\end{bmatrix}\tag{6.5.3}$$

$$\boldsymbol{V}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Q}=[\underset{k}{\boldsymbol{\Sigma}_B}\quad \underset{n-k}{\boldsymbol{O}}],\qquad \boldsymbol{\Sigma}_B=\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}_B & & \\ & \boldsymbol{S}_B & \\ & & \boldsymbol{I}_{k-r-s}\end{bmatrix}\tag{6.5.4}$$

式中

$$\boldsymbol{S}_A=\mathrm{diag}(\alpha_{r+1},\alpha_{r+2},\cdots,\alpha_{r+s}),\quad \boldsymbol{S}_B=\mathrm{diag}(\beta_{r+1},\beta_{r+2},\cdots,\beta_{r+s})\tag{6.5.5}$$

$$\left.\begin{aligned}1>\alpha_{r+1}\geqslant\cdots\geqslant\alpha_{r+s}>0\\ 0<\beta_{r+1}\leqslant\cdots\leqslant\beta_{r+s}<1\\ \alpha_i^2+\beta_i^2=1,\quad i=r+1,r+2,\cdots,r+s\end{aligned}\right\}\tag{6.5.6}$$

整数 k,r 和 s 分别为

$$k=\mathrm{rank}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{B}\end{bmatrix},\qquad r=\mathrm{rank}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{B}\end{bmatrix}-\mathrm{rank}(\boldsymbol{B})$$

和

$$s=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})+\mathrm{rank}(\boldsymbol{B})-\mathrm{rank}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{B}\end{bmatrix}$$

证明 本定理有多种证明方法，可参见 Van Loan [462]，Paige 与 Saunders [424]，Golub 与 Van Loan [184] 和 Zha [499] 的证明。这里给出的是 Zha 的构造性证明，它由四步组成，每一步都是下列形式的变换：

$$\boldsymbol{A}^{(k+1)}=\boldsymbol{U}^{(k)}\boldsymbol{A}^{(k)}\boldsymbol{Q}^{(k)},\qquad \boldsymbol{B}^{(k+1)}=\boldsymbol{V}^{(k)}\boldsymbol{B}^{(k)}\boldsymbol{Q}^{(k)}$$

其中，$\boldsymbol{U}^{(k)}$ 和 $\boldsymbol{V}^{(k)}$ 为酉矩阵，且 $\boldsymbol{Q}^{(k)}$ 非奇异。在每一步，只要规定 $\boldsymbol{U}^{(k)},\boldsymbol{V}^{(k)},\boldsymbol{Q}^{(k)}$ 以及变换后得到的矩阵 $\boldsymbol{A}^{(k+1)},\boldsymbol{B}^{(k+1)}$。令 $\boldsymbol{A}^{(1)}=\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}^{(1)}=\boldsymbol{B}$。

步骤 1　令矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的奇异值分解为 $\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}_1=\text{diag}(0,\boldsymbol{\Sigma}_B^{(1)})$，其中，$\boldsymbol{\Sigma}_B^{(1)}=\text{diag}(s_1,s_2,\cdots,s_t)$，并且 $s_1\geqslant s_2\geqslant\cdots\geqslant s_t>0$。令

$$\boldsymbol{U}^{(1)}=\boldsymbol{I},\quad \boldsymbol{V}^{(1)}=\boldsymbol{U}_1,\quad \boldsymbol{Q}^{(1)}=\boldsymbol{V}_1\text{diag}(\boldsymbol{I},\boldsymbol{\Sigma}_B^{-1})$$

则

$$\boldsymbol{A}^{(2)}=[\boldsymbol{A}_1^{(2)}\quad \boldsymbol{A}_2^{(2)}],\qquad \boldsymbol{B}^{(2)}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_t\end{bmatrix}$$

步骤 2　令矩阵 $\boldsymbol{A}_1^{(2)}$ 的奇异值分解为 $\boldsymbol{U}_2\boldsymbol{A}_1^{(2)}\boldsymbol{V}_2=\text{diag}(\boldsymbol{\Sigma}_A^{(2)},\boldsymbol{O})$，其中，$\boldsymbol{\Sigma}_A^{(2)}=\text{diag}(t_1,t_2,\cdots,t_r)$，且 $t_1\geqslant t_2\geqslant\cdots\geqslant t_r>0$。设

$$\boldsymbol{U}^{(2)}=\boldsymbol{U}_2,\quad \boldsymbol{V}^{(2)}=\boldsymbol{I},\quad \boldsymbol{Q}^{(2)}=\text{diag}(\boldsymbol{V}_2,\boldsymbol{I})\text{diag}((\boldsymbol{\Sigma}_A^{(2)})^{-1},\ \boldsymbol{I})$$

则

$$\boldsymbol{A}^{(3)}=\begin{array}{c}\begin{matrix} r & n-r-t & t\end{matrix}\\ \begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_{13}^{(3)}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}_{23}^{(3)}\end{bmatrix}\begin{matrix} r\\ m-r\end{matrix}\end{array},\qquad \boldsymbol{B}^{(3)}=\boldsymbol{B}^{(2)}$$

步骤 3　令 $\boldsymbol{A}_{23}^{(3)}$ 的奇异值分解为 $\boldsymbol{U}_3\boldsymbol{A}_{23}^{(3)}\boldsymbol{V}_3=\text{diag}(\boldsymbol{\Sigma}_A^{(3)},\boldsymbol{O})$，其中，$\boldsymbol{\Sigma}_A^{(3)}=\text{diag}(w_1,w_2,\cdots,w_s)$，且 $w_1\geqslant w_2\geqslant\cdots\geqslant w_s>0$。设 $\alpha_i=w_i(1+w_i^2)^{-1/2}$，$\beta_i=(1+w_i^2)^{-1/2}$，$i=r+1,r+2,\cdots,r+s$ 和 $\boldsymbol{S}_A=\text{diag}(\alpha_{r+1},\alpha_2,\cdots,\alpha_{r+s}),\boldsymbol{S}_B=\text{diag}(\beta_{r+1},\beta_{r+2},\cdots,\beta_{r+s})$。容易验证，$\alpha_i$ 和 $\beta_i\,(i=r+1,r+2,\cdots,r+s)$ 满足式 (6.5.6)。令

$$\begin{aligned}\boldsymbol{U}^{(3)}&=\text{diag}(\boldsymbol{I},\boldsymbol{U}_3)\\ \boldsymbol{V}^{(3)}&=\text{diag}(\boldsymbol{I},\boldsymbol{V}_3^{\text{H}})\\ \boldsymbol{Q}^{(3)}&=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I} & -\boldsymbol{A}_{13}^{(3)}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\text{diag}(\boldsymbol{I},\boldsymbol{V}_3)\text{diag}(\boldsymbol{I},\boldsymbol{S}_B,\boldsymbol{I})\end{aligned}$$

则

$$\boldsymbol{A}^{(4)}=\begin{array}{c}\begin{matrix} r & n-r-t & s & t-s\end{matrix}\\ \begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_r & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{S}_A & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{matrix} r\\ s\\ m-r-s\end{matrix}\end{array}$$

和

$$\boldsymbol{B}^{(4)}=\begin{array}{c}\begin{matrix} n-t & s & t-s\end{matrix}\\ \begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{S}_B & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I}_{k-r-s}\end{bmatrix}\begin{matrix} n-k+r\\ s\\ k-r-s\end{matrix}\end{array}$$

步骤 4 经过适当的矩阵置换 $\boldsymbol{P}_1$ 和 $\boldsymbol{P}_2$，并令 $k=t+r$ 后，我们得到

$$\boldsymbol{A}^{(5)}=\boldsymbol{A}^{(4)}\boldsymbol{P}_1=\left[\begin{array}{ccc:c}\boldsymbol{I}_r & & & \\ & \boldsymbol{S}_A & & \boldsymbol{O}\\ & & \boldsymbol{O}_A & \end{array}\right]$$

以及

$$\boldsymbol{B}^{(5)}=\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{B}^{(4)}\boldsymbol{P}_1=\left[\begin{array}{ccc:c}\boldsymbol{O}_B & & & \\ & \boldsymbol{S}_B & & \boldsymbol{O}\\ & & \boldsymbol{I}_{k-r-s} & \end{array}\right]$$

于是，就得到了所需要的伪对角形式。容易验证：

$$\text{rank}(\boldsymbol{A})=r+s,\qquad \text{rank}(\boldsymbol{B})=k-r,\qquad \text{rank}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{B}\end{bmatrix}=k$$

于是，本定理得证。 ■

根据文献 [462]，式 (6.5.3) 的对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_A$ 和式 (6.5.4) 的对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_B$ 的对角线上的元素组成广义奇异值对 (α_i,β_i)。由 $\boldsymbol{\Sigma}_A$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}_B$ 的形式，前 k 个广义奇异值对分为三种情况：

$$\alpha_i=1,\quad \beta_i=0,\quad i=1,2,\cdots,r$$

$$\alpha_i,\beta_i\quad (\boldsymbol{S}_A\text{和}\,\boldsymbol{S}_B\,\text{的元素}),\quad i=r+1,r+2,\cdots,r+s$$

$$\alpha_i=0,\quad \beta_i=1,\quad i=r+s+1,r+s+2,\cdots,k$$

这 k 个奇异值对 (α_i,β_i) 统称矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的非平凡广义奇异值对；而 $\alpha_i/\beta_i\,(i=1,2,\cdots,k)$ 称为矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的非平凡广义奇异值 (包括无穷大，有限值和零)。反之，对应于式 (6.5.3) 和式 (6.5.4) 中零列向量的另外 $n-k$ 对广义奇异值则称为矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的平凡广义奇异值对。

定理 6.5.1 限制矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列数不得大于行数。当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的维数不满足这一限制时，定理 6.5.1 便不能适用。Paige 与 Saunders [349] 推广了定理 6.5.1，提出了具有相同列数的任意矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义奇异值分解。

定理 6.5.3 (广义奇异值分解 2) [349] 假定矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{B}\in C^{p\times n}$，则对于分块矩阵

$$\boldsymbol{K}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{B}\end{bmatrix},\quad t=\text{rank}(\boldsymbol{K})$$

存在酉矩阵

$$\boldsymbol{U}\in C^{m\times m},\quad \boldsymbol{V}\in C^{p\times p},\quad \boldsymbol{W}\in C^{t\times t},\quad \boldsymbol{Q}\in C^{n\times n}$$

使得

$$\boldsymbol{U}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{\Sigma}_A[\underbrace{\boldsymbol{W}^{\rm H}\boldsymbol{R}}_{t},\underbrace{\boldsymbol{O}}_{n-t}]$$

$$\boldsymbol{V}^{\rm H}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{\Sigma}_B[\underbrace{\boldsymbol{W}^{\rm H}\boldsymbol{R}}_{t},\underbrace{\boldsymbol{O}}_{n-t}]$$

式中

$$\underset{m\times t}{\boldsymbol{\Sigma}_A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_A & & \\ & \boldsymbol{D}_A & \\ & & \boldsymbol{O}_A\end{bmatrix},\qquad \underset{p\times t}{\boldsymbol{\Sigma}_B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_B & & \\ & \boldsymbol{D}_B & \\ & & \boldsymbol{O}_B\end{bmatrix}\tag{6.5.7}$$

并且 $\boldsymbol{R}\in C^{t\times t}$ 非奇异，其奇异值等于矩阵 $\boldsymbol{K}$ 的非零奇异值。矩阵 $\boldsymbol{I}_A$ 为 $r\times r$ 单位矩阵，$\boldsymbol{I}_B$ 为 $(t-r-s)\times(t-r-s)$ 单位矩阵，其中，r 和 s 的值与所给数据有关，且 $\boldsymbol{O}_A$ 和 $\boldsymbol{O}_B$ 分别为 $(m-r-s)\times(t-r-s)$ 维和 $(p-t+r)\times r$ 维零矩阵 (这两个零矩阵有可能没有任何行或任何列)，而

$$\boldsymbol{D}_A=\mathrm{diag}(\alpha_{r+1},\alpha_{r+2},\cdots,\alpha_{r+s}),\qquad \boldsymbol{D}_B=\mathrm{diag}(\beta_{r+1},\beta_{r+2},\cdots,\beta_{r+s})$$

满足

$$1>\alpha_{r+1}\geqslant\alpha_{r+2}\geqslant\cdots\geqslant\alpha_{r+s}>0,\qquad 0<\beta_{r+1}\leqslant\beta_{r+2}\leqslant\cdots\leqslant\beta_{r+s}<1$$

和

$$\alpha_i^2+\beta_i^2=1,\quad i=r+1,r+2,\cdots,r+s$$

证明 参见文献 [231]。

求解广义特征值问题 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}$ 等价于求解 $\det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B})=0$。令 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $p\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的奇异值对是 (α,β)，并代入 $\lambda=\alpha/\beta$，则广义特征值问题又可进一步等价为求解 $\det(\beta^2\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}-\alpha^2\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})=0$。当矩阵 $\boldsymbol{B}$ 为正方矩阵，并且非奇异时，则有

$$\det(\beta^2\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}-\alpha^2\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})=0\iff\det[(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{-1})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{-1}-\alpha^2/\beta^2]=0$$

这说明，当 $\boldsymbol{B}$ 为非奇异的正方矩阵时，矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义奇异值分解等价于矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{-1}$ 的奇异值分解。

下面是有关广义奇异值分解的几点注释。

注释 1 由 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义奇异值分解与 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{-1}$ 的奇异值分解之间的等价性显见，若矩阵 $\boldsymbol{B}$ 为单位矩阵 $(\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I})$，则广义奇异值分解简化为普通的奇异值分解。这一观察结果也可从广义奇异值的定义直接得出。这是因为，单位矩阵的奇异值全部等于 1，从而矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{I})$ 的广义奇异值与 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值等价。

注释 2 由于 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{-1}$ 具有类似于商的形式，以及广义奇异值本身就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的奇异值之商，所以广义奇异值分解有时也被称作商奇异值分解 (quotient singular value decomposition, QSVD)。

注释 3 如果矩阵 $\boldsymbol{B}$ 不是正方的，或者 $\boldsymbol{B}$ 是奇异的正方矩阵，则 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{\dagger}$ (其中，$\boldsymbol{B}^{\dagger}$ 是 $\boldsymbol{B}$ 的 Moore-Perrose 广义逆) 的奇异值不一定对应为矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义奇异值。更严格地，有以下结论。

定理 6.5.4 [499] 定义

$$\boldsymbol{B}_A^{\dagger}=\boldsymbol{Q}\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}_B^{\mathrm{H}} & & \\ & \boldsymbol{S}_B^{-1} & \\ & & I\end{bmatrix}\boldsymbol{V}$$

若 $\text{rank}[\boldsymbol{A}^{\text{H}}, \boldsymbol{B}^{\text{H}}]^{\text{H}} = n$，则 $\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 是唯一定义的，并且 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 的奇异值包含了矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的全部有限大的广义奇异值。

证明[499] 由于 $\text{rank}[\boldsymbol{A}^{\text{H}}, \boldsymbol{B}^{\text{H}}]^{\text{H}} = n$，定理 6.5.2 中任何两组变换都满足下列关系：

$$\boldsymbol{Q}_1 = \boldsymbol{Q}_2\text{diag}(\boldsymbol{U}_{11},\boldsymbol{U}_{22},\boldsymbol{V}_{23})$$
$$\boldsymbol{U}_1^{\text{H}} = \boldsymbol{U}_2^{\text{H}}\text{diag}(\boldsymbol{U}_{11},\boldsymbol{U}_{22},\boldsymbol{V}_{23})$$
$$\boldsymbol{V}_1^{\text{H}} = \boldsymbol{V}_2^{\text{H}}\text{diag}(\boldsymbol{U}_{11},\boldsymbol{U}_{22},\boldsymbol{V}_{23})$$

因此

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{Q}_1\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}_B^{\text{H}} & & \\ & \boldsymbol{S}_B^{-1} & \\ & & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}_1 \\
&= \boldsymbol{Q}_2\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_{11} & & \\ & \boldsymbol{U}_{22} & \\ & & \boldsymbol{V}_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}_B^{\text{H}} & & \\ & \boldsymbol{S}_B^{-1} & \\ & & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}_{11} & & \\ & \boldsymbol{U}_{22} & \\ & & \boldsymbol{V}_{33}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}_2 \\
&= \boldsymbol{Q}_2\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}_B^{\text{H}} & & \\ & \boldsymbol{S}_B^{-1} & \\ & & \boldsymbol{I}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}_1
\end{aligned}$$

这就证明了，$\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 不存在病态问题。进一步地，我们观察

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_A^{\dagger}\boldsymbol{V}^{\text{H}} = \text{diag}(\boldsymbol{O},\boldsymbol{S}_A,\boldsymbol{S}_B^{-1},\boldsymbol{O})$$

只有矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的无穷大的广义奇异值变成了矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 的零奇异值，而其他的所有广义奇异值保留在 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 的奇异值内。 ■

下面进一步分析 $\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 的性质。容易验证，$\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 满足下列等式：

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}_A^{\dagger}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B} \tag{6.5.8}$$

$$\boldsymbol{B}_A^{\dagger}\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}_A^{\dagger} = \boldsymbol{B}_A^{\dagger} \tag{6.5.9}$$

$$(\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}_A^{\dagger})^{\text{H}} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{B}_A^{\dagger} \tag{6.5.10}$$

注意，矩阵 $\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 是只满足 Moore-Penrose 广义逆矩阵条件 (1)，(2) 和 (3)，而不满足条件 (4) 的正规化广义逆矩阵。

下面的定理 [499] 表明，$\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 是一种约束最小化问题的唯一解。

定理 6.5.5 若 $[\boldsymbol{A}^{\text{H}}, \boldsymbol{B}^{\text{H}}]^{\text{H}}$ 是满列秩的，则 $\boldsymbol{B}_A^{\dagger}$ 是下列约束极小化问题的唯一解：

$$\min_{\boldsymbol{X}\in C^{n\times q}} \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\|_{\text{F}} \tag{6.5.11}$$

服从约束条件

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B} \tag{6.5.12}$$

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X} \tag{6.5.13}$$

$$(\boldsymbol{B}\boldsymbol{X})^{\text{H}} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{X} \tag{6.5.14}$$

$\|AX\|_F$ 的极小化值为 $\sqrt{\sum_{i=r+1}^{r+s}(\alpha_i/\beta_i)^2}$。

证明[499] 令 B 具有奇异值分解

$$VBQ=[\Sigma_B,O]$$

其中，Σ_B 有 k 列。由于 $\text{rank}[A^H,B^H]^H=n$，所以 $k=n$，并且 $B=V^H\Sigma_BQ^{-1}$。作矩阵分块 $Q^{-1}XV^H=(X_{ij})_{i,j=1}^3$，并使之适应 Σ_A 和 Σ_B 的分块形式，则可证明，为了满足约束条件式 (6.5.12)~ 式 (6.5.14)，X 应具有以下形式：

$$X=Q\begin{bmatrix}O & X_{12} & X_{13}\\ O & S_B^{-1} & O\\ O & O & I_{n-r-s}\end{bmatrix}V$$

这是因为

$$\begin{aligned}\|AX\|_F^2&=\|UAQQ^{-1}XV^H\|_F^2\\&=\left\|\begin{bmatrix}I_r & & \\ & S_A & \\ & & O\end{bmatrix}\begin{bmatrix}O & X_{12} & X_{13}\\ O & S_B^{-1} & O\\ O & O & I_{n-r-s}\end{bmatrix}\right\|_F^2\\&=\|[X_{12}\ X_{13}]\|_F^2+\|S_AS_B^{-1}\|_F^2\\&\geqslant\|S_AS_B^{-1}\|_F^2\\&=\sum_{i=r+1}^{r+s}\left(\frac{\alpha_i}{\beta_i}\right)^2\end{aligned}$$

等式成立，当且仅当 $X_{12}=O$ 和 $X_{13}=O$，即 $X=B_A^{\dagger}$。 ■

6.5.3 广义奇异值分解的实际算法

如果 A 或 B 相对于方程求解是病态的，那么计算 AB^{-1} 通常会导致非常大的数值误差，所以对 AB^{-1} 本身进行奇异值分解一般并不值得推荐采用。一个自然会问的问题是，能否绕开计算 AB^{-1} 这一步，而直接得到 $C=AB^{-1}$ 的奇异值分解？这是完全可能的，因为 $C=AB^{-1}$ 的奇异值分解实质上就是两个矩阵乘积的奇异值分解。

Paige [351] 根据 $C=AB^{-1}$ 的奇异值分解与矩阵乘积的奇异值分解形式上的一致，提出了一种实际的广义奇异值分解算法。这种算法的关键是如何避免矩阵求逆 B^{-1} 以及如何适用于矩阵 B 奇异的一般情况。

先讨论矩阵 B 非奇异的情况。令 A_{ij} 和 B_{ij} 均代表 2×2 矩阵，它们的元素分别位于 A 的第 i,j 行和 B 的第 i,j 列。如果选择酉矩阵 U 和 V 使得

$$U^HA_{ij}B_{ij}^{-1}V=S \tag{6.5.15}$$

是对角矩阵，则

$$U^HA_{ij}=SV^HB_{ij} \tag{6.5.16}$$

结果是，$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_{ij}$ 的第 1 行与 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_{ij}$ 的第 1 行平行，$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_{ij}$ 的第 2 行与 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_{ij}$ 的第 2 行平行。因此，如果 $\boldsymbol{Q}$ 是使得 $\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_{ij}\boldsymbol{Q}$ 为下三角矩阵的酉矩阵，即

$$(\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_{ij})\boldsymbol{Q} = \begin{bmatrix} \times & \otimes \\ \times & \times \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \times & \\ \times & \times \end{bmatrix} \tag{6.5.17}$$

则 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_{ij}\boldsymbol{Q}$ 也是下三角矩阵。对于 $n \times n$ 上三角矩阵 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{-1}$，可以执行 $n(n-1)/2$ 次 2×2 Kogbetliantz 算法，使矩阵 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 在上三角和下三角形式之间来回变换，最后收敛为对角矩阵形式。

广义奇异值分解也可等价叙述为以下定理 [184]。

定理 6.5.6 若 $\boldsymbol{A} \in C^{m_1 \times n}(m_1 \geqslant n)$，$\boldsymbol{B} \in C^{m_2 \times n}(m_2 \geqslant n)$，则存在一非奇异矩阵 $\boldsymbol{X} \in C^{n \times n}$ 使得

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{X} = \boldsymbol{D}_A = \mathrm{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n), \quad \alpha_k \geqslant 0$$

和

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})\boldsymbol{X} = \boldsymbol{D}_B = \mathrm{diag}(\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_n), \quad \beta_k \geqslant 0$$

式中，$\sigma_k = \sqrt{\alpha_k/\beta_k}$ 称为矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的广义奇异值，且 $\boldsymbol{X}$ 的列 $\boldsymbol{x}_k$ 称为与 σ_k 对应的广义奇异向量。

定理 6.5.6 给出了计算矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的广义奇异值分解的多种算法。特别地，我们对寻求使 $\boldsymbol{D}_B$ 为单位矩阵的广义奇异向量矩阵 $\boldsymbol{X}$ 更加感兴趣，因为在这一情况下，广义奇异值 σ_k 由 $\sqrt{\alpha_k}$ 直接给出。下面就是这样的两种实际算法。

算法 6.5.1 (GSVD 算法 1)[463]

步骤 1　计算矩阵的内积 $\boldsymbol{S}_1 = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{S}_2 = \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$。

步骤 2　计算 $\boldsymbol{S}_2$ 的特征值分解 $\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}_2\boldsymbol{U}_2 = \boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(\gamma_1, \gamma_2, \cdots, \gamma_n)$。

步骤 3　计算 $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{U}_2\boldsymbol{D}^{-1/2}$ 和 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{Y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{Y}$。

步骤 4　计算 $\boldsymbol{C}$ 的特征值分解 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{Q} = \mathrm{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n)$，其中，$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$。

步骤 5　广义奇异向量矩阵为 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Y}\boldsymbol{Q}$，且广义奇异值为 $\sqrt{\alpha_k}$, $k = 1, 2, \cdots, n$。

证明　直接计算给出

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}_1\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{Q} = \mathrm{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n)$$

由步骤 2 的结果，我们有

$$\boldsymbol{Y}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})\boldsymbol{Y} = (\boldsymbol{U}_2\boldsymbol{D}^{-1/2})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}_2(\boldsymbol{U}_2\boldsymbol{D}^{-1/2}) = \boldsymbol{I}$$

由于 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$，所以上式分别左乘 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}$ 和右乘 $\boldsymbol{Q}$ 后，则有

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})\boldsymbol{X} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Y}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})\boldsymbol{Y}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$$ ■

算法 6.5.2 (GSVD 算法 2)[463]

步骤 1　计算 $\boldsymbol{B}$ 的奇异值分解 $\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}_2 = \boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(\gamma_1, \gamma_2, \cdots, \gamma_n)$。

步骤 2 计算 $\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{V}_2\boldsymbol{D}^{-1}\boldsymbol{V}_2 = \mathrm{diag}(1/\gamma_1, 1/\gamma_2, \cdots, 1/\gamma_n)$。

步骤 3 计算 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{AY}$。

步骤 4 计算矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的奇异值分解 $\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{CV}_1 = \boldsymbol{D}_A = \mathrm{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n)$。

步骤 5 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{YV}_1$ 为广义奇异向量矩阵，而 $\alpha_k, k = 1, 2, \cdots, n$ 直接是矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的广义奇异值。

证明 根据算法各步骤的计算结果，有

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AX}) = \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{AY})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{AY})\boldsymbol{V}_1 = \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C})\boldsymbol{V}_1 = \mathrm{diag}(\alpha_1^2, \alpha_2^2, \cdots, \alpha_n^2)$$

对 $\boldsymbol{Y}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})\boldsymbol{Y} = \boldsymbol{I}$ 左乘 $\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}$ 和右乘 $\boldsymbol{V}_1$ 得到

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})\boldsymbol{X} = \boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{IV}_1 = \boldsymbol{I}$$

这就证明了 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})\boldsymbol{X}$ 分别具有所希望的形式。 ■

算法 6.5.1 与算法 6.5.2 的主要区别在于：前者需要计算矩阵乘积 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$，而后者则完全避免了这一计算。正如前面已说明的那样，在计算两个矩阵乘积时会发生信息的丢失，并会使条件数变坏。因此，算法 6.5.2 具有比算法 6.5.1 更好的数值性能。但是，由于需要矩阵求逆或矩阵乘积的计算，算法 6.5.1 和算法 6.5.2 的性能或多或少都会遭到损害。

一种可以避免任何矩阵求逆或矩阵内积运算的广义奇异值分解算法由 Speiser 与 Van Loan [424] 提出 (也见文献 [463])。

算法 6.5.3 (GSVD 算法 3)

步骤 1 计算 QR 分解

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{B} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}_1 \\ \boldsymbol{Q}_2 \end{bmatrix} \boldsymbol{R}$$

其中，$\boldsymbol{Q}_1$ 和 $\boldsymbol{Q}_2$ 分别与 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 具有相同的维数，且 $\boldsymbol{R} \in C^{n\times n}$ 为上三角矩阵。假定 $\boldsymbol{R}$ 非奇异，即 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}) \cap \mathrm{Null}(\boldsymbol{B}) = \{0\}$。

步骤 2 计算 CS 分解

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}_1 \\ \boldsymbol{Q}_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{U}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{C} \\ \boldsymbol{S} \end{bmatrix} \boldsymbol{V}$$

其中，$\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2$ 和 $\boldsymbol{V}$ 为酉矩阵，$\boldsymbol{C} = \mathrm{diag}(\cos(\theta_k))$，$\boldsymbol{S} = \mathrm{diag}(\sin(\theta_k))$，且 $0 \leqslant \theta_1 \leqslant \cdots \leqslant \theta_n \leqslant \pi/2$。由此可知，若 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{V}$，则 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} - \mu^2\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})\boldsymbol{X} = \boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C} - \lambda\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}$，因此，广义奇异值由 $\mu_k = \cot(\theta_k)$ 给出。

步骤 3 利用 $c_d > \epsilon + c_n \geqslant c_{d+1} \geqslant \cdots \geqslant c_n \geqslant 0$ ($\epsilon > 0$ 为小的扰动)，其中，$c_k = \cos(\theta_k)$。

步骤 4 计算乘积 $\boldsymbol{ZT} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V}$ 的 QR 分解，其中，$\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \cdots, \boldsymbol{z}_n]$ 为酉矩阵，$\boldsymbol{T} \in C^{n\times n}$ 为上三角矩阵。由于

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{V} = (\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R})^{-1} = (\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V})^{-H} = (\boldsymbol{ZT})^{-\mathrm{H}} = \boldsymbol{ZT}^{-\mathrm{H}}$$

且 $\boldsymbol{T}^{-\mathrm{H}}$ 为下三角矩阵，故有 $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{z}_{d+1},\boldsymbol{z}_{d+2},\cdots,\boldsymbol{z}_n\}=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{x}_{d+1},\boldsymbol{x}_{d+2},\cdots,\boldsymbol{x}_n\}$。

定理 6.5.7 由算法 6.5.3 产生的向量 $\{\boldsymbol{z}_{d+1},\boldsymbol{z}_{d+2},\cdots,\boldsymbol{z}_n\}$ 准确张成广义奇异值分解问题 $\tilde{\boldsymbol{A}}^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{A}}-\lambda\tilde{\boldsymbol{B}}^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{B}}$ 的最小奇异值子空间，其中

$$\left\|\begin{bmatrix}\tilde{\boldsymbol{A}}\\ \tilde{\boldsymbol{B}}\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{B}\end{bmatrix}\right\|_{\mathrm{F}}\leqslant\epsilon\|\boldsymbol{R}\|_{\mathrm{F}}$$

其中，$\boldsymbol{R}$ 由步骤 4 的 QR 分解给出。

证明 定义 $\tilde{\boldsymbol{C}}=\mathrm{diag}(\cos\tilde{\theta}_k)$，$\tilde{\boldsymbol{S}}=\mathrm{diag}(\sin\tilde{\theta}_k)$，其中，$\tilde{\theta}_k=\theta_k$。令 $\tilde{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{U}_1\tilde{\boldsymbol{C}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}$，$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}_2\tilde{\boldsymbol{S}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}$。由于

$$\tilde{\boldsymbol{A}}-\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}_1(\tilde{\boldsymbol{C}}-\boldsymbol{C})\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}$$

和

$$\tilde{\boldsymbol{B}}-\boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}_2(\tilde{\boldsymbol{S}}-\boldsymbol{S})\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}$$

所以

$$\left\|\begin{bmatrix}\tilde{\boldsymbol{A}}\\ \tilde{\boldsymbol{B}}\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}\\ \boldsymbol{B}\end{bmatrix}\right\|_{\mathrm{F}}=\left\|\begin{bmatrix}\tilde{\boldsymbol{C}}-\boldsymbol{C}\\ \tilde{\boldsymbol{S}}-\boldsymbol{S}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}\right\|_{\mathrm{F}}\leqslant\epsilon\|\boldsymbol{R}\|_{\mathrm{F}}$$ ■

1998 年，Drmac 提出了计算广义奇异值分解的正切算法 (tangent algorithm) [135]。这种算法分两个阶段进行：第一阶段将矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 简化为一个矩阵 $\boldsymbol{F}$；第二阶段计算矩阵 $\boldsymbol{F}$ 的奇异值分解。正切算法的理论基础是：广义奇异值分解在等价变换下是不变的，即

$$(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})\to(\boldsymbol{A}',\boldsymbol{B}')=(\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S},\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{S})\tag{6.5.18}$$

式中，$\boldsymbol{U},\boldsymbol{V}$ 是任意的正交矩阵，且 $\boldsymbol{S}$ 是任意的非奇异矩阵。因此，根据定义，两个矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 和 $(\boldsymbol{A}',\boldsymbol{B}')$ 具有相同的广义奇异值分解。

算法 6.5.4 (广义奇异值分解的正切算法) [135]

输入 矩阵 $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n]\in R^{m\times n},\boldsymbol{B}\in R^{p\times n}$，$m\geqslant n$，$\mathrm{rank}(\boldsymbol{B})=n$

步骤 1 计算

$$\boldsymbol{\Delta}_A=\mathrm{diag}(\|\boldsymbol{a}_1\|_2,\|\boldsymbol{a}_2\|_2,\cdots,\|\boldsymbol{a}_n\|_2)$$
$$\boldsymbol{A}_c=\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Delta}_A^{-1},\quad \boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{B}\boldsymbol{\Delta}_A^{-1}$$

步骤 2 利用具有列旋转的 Householder QR 分解算法计算

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{\Pi}$$

步骤 3 通过求解矩阵方程 $\boldsymbol{F}\boldsymbol{R}=\boldsymbol{A}_c\boldsymbol{\Pi}$，计算 $\boldsymbol{F}=\boldsymbol{A}_c\boldsymbol{\Pi}\boldsymbol{R}^{-1}$。

步骤 4 计算矩阵 $\boldsymbol{F}$ 的奇异值分解

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{F}\boldsymbol{U}$$

步骤 5 计算矩阵

$$X = \Delta_A^{-1} \Pi R^{-1} U, \quad W = Q \begin{bmatrix} U & O \\ O & I_{p-n} \end{bmatrix}$$

输出 (A, B) 的广义奇异值分解读作

$$\begin{bmatrix} V^{\mathrm{T}} & A \\ W^{\mathrm{T}} & B \end{bmatrix} X = \begin{bmatrix} \Sigma & \\ & O \\ I & \\ & O \end{bmatrix}$$

6.5.4 二次型不等式约束最小二乘

在最小二乘中，经常需要在 R^n 的一个真子集内极小化 $\|Ax - b\|_2$。例如，当我们试图对有噪声的数据拟合一函数时，需要

$$在\ \|Bx\|_2 \leqslant \alpha\ 约束下, \quad 极小化\ \|Ax - b\|_2 \tag{6.5.19}$$

其中，$A \in R^{m\times n}, b \in R^m, B \in R^{n\times n}$ (非奇异)，且 $\alpha \geqslant 0$。这样一种在二次型不等式约束下的最小二乘问题简称为二次型不等式约束最小二乘 (LSQI) 问题 [184]。

更一般地，有下列问题：

$$在\ \|Bx - d\|_2 \leqslant \alpha\ 约束下, \quad 极小化\ \|Ax - b\|_2 \tag{6.5.20}$$

其中，$A \in R^{m\times n} (m \geqslant n), b \in R^m, B \in R^{p\times n}, d \in R^p$ 和 $\alpha \geqslant 0$。广义奇异值分解清楚地表明了 LSQI 问题的可解性。若

$$\left.\begin{aligned} &U^{\mathrm{T}} AX = \mathrm{diag}(\alpha_1, \alpha_2, \cdots, \alpha_n), \quad U^{\mathrm{T}} U = I_m \\ &V^{\mathrm{T}} BX = \mathrm{diag}(\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_q), \quad V^{\mathrm{T}} V = I_p, \quad q = \min\{p, n\} \end{aligned}\right\} \tag{6.5.21}$$

是 (A, B) 的广义奇异值分解，则 LSQI 问题变换成

$$在\ \|D_B y - \tilde{d}\|_2 \leqslant \alpha\ 约束下, \quad 极小化\ \|D_A y - \tilde{b}\|_2$$

其中，$\tilde{b} = U^{\mathrm{T}} b, \tilde{d} = V^{\mathrm{T}} d$, $y = X^{-1} x$。目标函数的直接形式为

$$\|D_A y - \tilde{b}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{n} (\alpha_i y_i - b_i)^2 + \sum_{i=n+1}^{m} \tilde{b}_i^2 \tag{6.5.22}$$

约束方程为

$$\|D_B y - \tilde{d}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{r} (\beta_i y_i - \tilde{d}_i)^2 + \sum_{i=r+1}^{m} \tilde{d}_i^2 \leqslant \alpha^2 \tag{6.5.23}$$

这就简化了 LSQI 问题的分析。这里，$r = \mathrm{rank}(B)$，并假定 $\beta_{r+1} = \beta_{r+2} = \cdots = \beta_q = 0$。

下面分析简化之后的 LSQI 问题式 (6.5.23)。首先，当且仅当

$$\sum_{i=r+1}^{p} \tilde{d}_i^2 \leqslant \alpha^2$$

LSQI 问题有解。如果在上式中取等号，则式 (6.5.22) 和式 (6.5.23) 一并表明，由

$$y_i = \begin{cases} \tilde{d}_i/\beta_i, & i = 1, 2, \cdots, r \\ \tilde{b}_i/\alpha_i, & i = r+1, r+2, \cdots, n;\ \alpha \neq 0 \\ 0, & i = r+1, r+2, \cdots, n;\ \alpha = 0 \end{cases} \tag{6.5.24}$$

定义的向量是 LSQI 问题的解。另一方面

$$\sum_{i=r+1}^{p} \tilde{d}_i^2 < \alpha^2 \tag{6.5.25}$$

时，向量

$$y_i = \begin{cases} \tilde{b}_i/\alpha_i, & \alpha_i \neq 0 \\ \tilde{d}_i/\beta_i, & \alpha_i = 0 \end{cases} \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

是 $\|D_A y - \tilde{b}_i\|_2$ 的极小化变量。如果这个向量也是可行的，则我们就得到了式 (6.5.20) 的解 (然而，它不一定是最小范数解)。因此，假定

$$\sum_{i=1,\ \alpha_i \neq 0} \left(\beta_i \frac{\tilde{b}_i}{\alpha_i} - \tilde{d}_i \right)^2 + \sum_{i=q+1}^{p} \tilde{d}_i^2 > \alpha^2 \tag{6.5.26}$$

这意味着，LSQI 问题的解发生在可行集的边界。剩下的目标就是

$$\text{在} \|\boldsymbol{D}_B \boldsymbol{y} - \tilde{\boldsymbol{d}}\|_2 = \alpha \text{约束下，} \qquad \text{极小化} \|\boldsymbol{D}_A \boldsymbol{y} - \tilde{\boldsymbol{b}}\|_2$$

可以用 Lagrange 乘数法求解这一问题。为此，定义

$$Q(\lambda, \boldsymbol{y}) = \|\boldsymbol{D}_A \boldsymbol{y} - \tilde{\boldsymbol{b}}\|_2^2 + \lambda(\|\boldsymbol{D}_B \boldsymbol{y} - \tilde{\boldsymbol{d}}\|_2^2 - \alpha^2)$$

并令 $\partial Q/\partial y_i = 0, i = 1, 2, \cdots, n$，即得线性方程组

$$(\boldsymbol{D}_A^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D}_A + \lambda \boldsymbol{D}_B^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D}_B) \boldsymbol{y} = \boldsymbol{D}_B^{\mathrm{T}} \tilde{\boldsymbol{b}} + \lambda \boldsymbol{D}_B^{\mathrm{T}} \tilde{\boldsymbol{d}}$$

假定系数矩阵是非奇异的，则上述方程组的解向量 $\boldsymbol{y}(\lambda)$ 的元素为

$$y_i(\lambda_i) = \begin{cases} \dfrac{\alpha_i \tilde{b}_i + \lambda \beta_i \tilde{d}_i}{\alpha_i^2 + \lambda \beta_i^2}, & i = 1, 2, \cdots, q \\ \dfrac{\tilde{b}_i}{\alpha_i}, & i = q+1, q+2, \cdots, n \end{cases}$$

式中，Lagrange 乘数 λ 由

$$\phi(\lambda) = \|\boldsymbol{D}_B \boldsymbol{y}(\lambda) - \tilde{\boldsymbol{d}}\|_2^2 = \sum_{i=1}^{r} \alpha_i \frac{\beta_i \tilde{b}_i - \alpha_i \tilde{d}_i^2}{\alpha_i^2 + \lambda \beta_i^2} + \sum_{r+1}^{p} \tilde{d}_i^2 = \alpha^2$$

的解决定。这类方程称为长期方程 (secular equations)。由式 (6.5.26) 可看出 $\phi(0) > \alpha^2$。又由于 $\phi(\lambda)$ 对于 $\lambda > 0$ 是单调递减的，因此，式 (6.5.26) 意味着存在唯一的正 λ^* 满足

$\phi(\lambda^*) = \alpha^2$。可以利用任一种标准的求根方法求出这个根。最后，原 LSQI 问题的解由 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{y}(\lambda^*)$ 给出。

最近几年，广义奇异值分解在语音信号处理和模式识别中相继被应用。

多麦克风在离散时间 k 采集的含噪声语音信号可以用观测模型

$$\boldsymbol{y}[k] = \boldsymbol{x}[k] + \boldsymbol{v}[k]$$

描述。式中，$\boldsymbol{x}[k]$ 和 $\boldsymbol{v}[k]$ 分别为语音信号向量和加性噪声向量。若令 $\boldsymbol{R}_{yy} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{y}[k]\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}[k]\}$，$\boldsymbol{R}_{vv} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{v}[k]\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}[k]\}$ 分别代表观测数据的自相关矩阵和加性噪声的自相关矩阵，则可以对它们进行联合对角化，即

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{R}_{yy} &= \boldsymbol{Q}\mathrm{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \cdots, \sigma_m^2)\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{R}_{vv} &= \boldsymbol{Q}\mathrm{diag}(\eta_1^2, \eta_2^2, \cdots, \eta_m^2)\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\end{aligned}\right\} \tag{6.5.27}$$

2002 年，Doclo 与 Moonen [128] 证明了，为了实现多麦克风语音增强，使均方误差最小的最优滤波器为

$$\boldsymbol{W}[k] = \boldsymbol{R}_{yy}^{-1}[k]\boldsymbol{R}_{xx}[k] = \boldsymbol{R}_{yy}^{-1}[k](\boldsymbol{R}_{yy}[k] - \boldsymbol{R}_{vv}[k]) \tag{6.5.28}$$

$$= \boldsymbol{Q}^{-\mathrm{T}}\mathrm{diag}\left(1 - \frac{\sigma_1^2}{\eta_1^2}, 1 - \frac{\sigma_2^2}{\eta_2^2}, \cdots, 1 - \frac{\sigma_m^2}{\eta_m^2}\right)\boldsymbol{Q} \tag{6.5.29}$$

构造 $p \times m$ 观测数据矩阵 $\boldsymbol{Y}[k]$ 和 $q \times m$ 加性噪声矩阵 $\boldsymbol{V}[k']$ 如下：

$$\boldsymbol{Y}[k] = \begin{bmatrix}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}[k-p+1]\\ \vdots\\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}[k-1]\\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}[k]\end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{V}[k'] = \begin{bmatrix}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}[k'-q+1]\\ \vdots\\ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}[k'-1]\\ \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}[k']\end{bmatrix} \tag{6.5.30}$$

式中，$\boldsymbol{V}[k']$ 是平时在无语音信号时测量得到的相同环境下的加性噪声数据矩阵。于是，只要计算矩阵束 $(\boldsymbol{Y}[k], \boldsymbol{V}[k'])$ 的广义奇异值分解，得到 $\boldsymbol{Q}$ 和广义奇异值 σ_i/η_i，即可直接获得最优滤波器 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}[k]$。理论和仿真结果表明，这种基于广义奇异值分解的最优滤波器显示了波束形成器的空间指向特性，有着很好的多麦克风语音增强效果。

在信息恢复系统中，降维技术对处理大批量数据是至关重要的。为此，数据的低维表示必须是全部文本数据一个很好的逼近。模式识别通过使类内散布最小、类间散布最大，对数据进行聚类。然而，这种识别分析要求类内散布矩阵或类间散布矩阵必须有一个是非奇异的。但是，文本数据矩阵往往不能满足这一要求。2003 年，Howland 等人 [231] 证明了，利用广义奇异值分解，无论文本数据维数多少，都可以实现聚类；并且直接使用数据矩阵的广义奇异值分解，还可避免使用散布矩阵带来的数值稳定性问题。基于广义奇异值分解，文献 [231] 提出了聚类文本数据的降维方法，这种方法能够有效保持文本数据的结构。

6.6 约束奇异值分解

前几节分别介绍了奇异值分解 (SVD)，矩阵乘积的奇异值分解 (PSVD) 和矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义奇异值分解 (GSVD)，并在上一节分析了三种奇异值分解之间的关系。

现在考虑一个新的问题：假定矩阵

$$\boldsymbol{A}_0=\begin{bmatrix}0 & 1\\ a_2 & a_1\end{bmatrix}$$

是从二阶常微分方程

$$\frac{\mathrm{d}^2x}{\mathrm{d}t^2}-a_2\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}-a_1x=f$$

得到的，则矩阵 $\boldsymbol{A}_0$ 的四个元素中只有 a_1 和 a_2 有误差，元素“0”和“1”是精确的。于是，矩阵 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}_0+\boldsymbol{E}$ 的误差矩阵 $\boldsymbol{E}$ 可以有三种情况。

情况 1　仅 a_2 可变

$$\boldsymbol{E}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ e_{21} & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}e_{21}[1\ \ 0]$$

情况 2　仅 a_1 可变

$$\boldsymbol{E}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & e_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}e_{22}[0\ \ 1]$$

情况 3　a_1 和 a_2 均可变

$$\boldsymbol{E}=\begin{bmatrix}0 & 0\\ e_{21} & e_{22}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}[e_{21}\ \ e_{22}]$$

观察知，上述三种形式的任何一种误差矩阵 $\boldsymbol{E}$ 都不可能改变原矩阵 $\boldsymbol{A}_0$ 的秩。然而，前面几节的三种奇异值分解都不能够得到并解释这一结果。这说明，需要有另外的奇异值分解方法来分析这类问题。本节介绍解决这类问题的约束奇异值分解方法。约束奇异值分解略写为 RSVD (restricted SVD)，它是由 Zha [499] 提出，并由 Moor 与 Golub [111] 进一步分析的。

6.6.1 约束奇异值

在广义奇异值中，我们考虑的是矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的奇异值。正如情况 1 至情况 3 所示，误差矩阵一般可表示为三个矩阵的乘积，即 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{BDC}$ 的形式。如果要考虑复矩阵 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}_0+\boldsymbol{E}$ 的秩的确定，很自然地会使我们联想到应该考虑矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的奇异值。令 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n},\boldsymbol{B}\in C^{m\times p},\boldsymbol{D}\in C^{p\times q},\boldsymbol{C}\in C^{q\times n}$，则有以下定义。

定义 6.6.1 (约束奇异值)[499]　矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的约束奇异值定义为

$$\sigma_k(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=\min_{\boldsymbol{D}\in C^{p\times q}}\{\|\boldsymbol{D}\|_{\mathrm{F}}|\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{BDC})\leqslant k-1\},\quad k=1,2,\cdots,n \tag{6.6.1}$$

关于上述定义，应注意以下几点。

注释1 如果对于某个 $k(1 \leqslant k \leqslant n)$，不存在满足 $\text{rank}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{BDC}) \leqslant k-1$ 的矩阵 $\boldsymbol{D}$，则约束奇异值 $\sigma_k(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 定义为无穷大。

注释2 如果 $m<n$ 和 $m<k\leqslant n$，则 $\sigma_k(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=0$。

注释3 从定义容易看出，约束奇异值按非减次序排列，即

$$\sigma_k(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}) \geqslant \sigma_{k+1}(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}), \qquad k=1,2,\cdots,n-1$$

作为进一步的说明，仍然以情况 1～ 情况 3 为例，它们的约束奇异值分别如下 [499]。

对于情况 1

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ a_2 & a_1\end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{C}=[1,\ 0]$$

约束奇异值为

$$\sigma_1(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=\infty, \qquad \sigma_2(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=|a_2|$$

对于情况 2

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ a_2 & a_1\end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{C}=[0,\ 1]$$

约束奇异值为

$$\sigma_1(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=\infty, \quad \sigma_2(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=\infty, \quad \text{若 } a_2\neq 0$$
$$\sigma_1(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=\infty, \quad \sigma_2(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=0, \quad \text{若 } a_2=0$$

对于情况 3

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0 & 1\\ a_2 & a_1\end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}0\\1\end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 1\end{bmatrix}$$

约束奇异值为

$$\sigma_1(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=\infty, \qquad \sigma_2(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})=|a_2|$$

以上是低阶矩阵三元组的情况，它们的约束奇异值容易直接观察得出。对于高阶的矩阵三元组，约束奇异值需要有约束奇异值分解方法才能求出，详见下一小节讨论。

有趣的是，前面几节介绍的奇异值和广义奇异值都可以看作是约束奇异值的特例。

(1) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值可以通过令 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}_m$ 和 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{I}_n$ 从矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的约束奇异值得到。

(2) 矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{C})$ 的广义奇异值就是矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{I}_m,\boldsymbol{C})$ 的约束奇异值。

更严格地，我们可以用下面的两个命题来叙述以上结论。

命题 6.6.1 [499] 假定矩阵 $\boldsymbol{B}\neq\boldsymbol{O}$ 和 $\boldsymbol{C}\neq\boldsymbol{O}$，则

$$\sigma_k(\boldsymbol{A},\boldsymbol{I}_m,\boldsymbol{I}_n)=\sigma_k, \qquad k=1,2,\cdots,n \tag{6.6.2}$$

式中，σ_k 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值。

命题 6.6.2 [499] 约束奇异值和广义奇异值之间存在下列关系:

$$\sigma_i(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{I}_m, \boldsymbol{C}) = \begin{cases} \dfrac{\alpha_i}{\beta_i}, & i = 1, 2, \cdots, k \\ 0, & i = k+1, k+2, \cdots, n \end{cases} \tag{6.6.3}$$

6.6.2 约束奇异值分解

上一小节定义了约束奇异值，并分析了约束奇异值与奇异值、广义奇异值之间的关系。现在，我们来讨论如何实现约束奇异值分解，以得到约束奇异值。我们假定矩阵 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 为一般的矩阵。实现约束奇异值分解的关键是下面的重要观察。

引理 6.6.1 令 $\boldsymbol{P} \in \boldsymbol{C}^{m\times m}$ 和 $\boldsymbol{Q} \in C^{n\times n}$ 是非奇异的矩阵，并令 $\boldsymbol{U} \in C^{p\times p}$ 和 $\boldsymbol{V} \in C^{q\times q}$ 为酉矩阵，则

$$\sigma_k(\boldsymbol{PAQ}, \boldsymbol{PBU}, \boldsymbol{VCQ}) = \sigma_k(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}), \qquad k = 1, 2, \cdots, n \tag{6.6.4}$$

上述引理规定了对矩阵 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}$ 进行的线性变换的类型，它们必须能够保持矩阵三元组的约束奇异值不改变。因此，约束奇异值分解的关键就是寻找这样的变换。

定理 6.6.1 (约束奇异值分解) [499] 令 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}, \boldsymbol{B} \in C^{m\times p}$, $\boldsymbol{C} \in C^{q\times n}$，则存在非奇异矩阵 $\boldsymbol{P} \in C^{m\times m}$ 和 $\boldsymbol{Q} \in C^{n\times n}$ 以及酉矩阵 $\boldsymbol{U} \in C^{p\times p}$ 和 $\boldsymbol{V} \in C^{q\times q}$ 使得

$$\boldsymbol{PAQ} = \overset{\begin{matrix} n-t_1 & t_1 \end{matrix}}{\begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_A & \\ & \boldsymbol{O}_A^{(2)} \end{bmatrix}} \begin{matrix} m-t_1 \\ t_1 \end{matrix}, \quad \boldsymbol{PBU} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_B \\ \boldsymbol{O}_B^{(2)} \end{bmatrix} \begin{matrix} m \\ m-t_2 \end{matrix}, \quad \boldsymbol{VCQ} = \overset{\begin{matrix} n-t_1 & t_1 \end{matrix}}{[\boldsymbol{\Sigma}_C, \ \boldsymbol{O}_C^{(2)}]}$$

成立，其中

$$\boldsymbol{\Sigma}_A = \overset{\begin{matrix} j & k & l & r & s_1 \end{matrix}}{\begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_j & & & & \\ & \boldsymbol{I}_k & & & \\ & & \boldsymbol{I}_l & & \\ & & & \boldsymbol{S}_A & \\ & & & & \boldsymbol{O}_A^{(1)} \end{bmatrix}} \begin{matrix} j \\ k \\ l \\ r \\ s_2 \end{matrix} \tag{6.6.5}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_B = \overset{\begin{matrix} j & p-j-r-s_2 & r & s_2 \end{matrix}}{\begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_j & & & \\ & \boldsymbol{O}_B^{(1)} & & \\ & & \boldsymbol{S}_B & \\ & & & \boldsymbol{I}_{s_2} \end{bmatrix}} \begin{matrix} j \\ k+l \\ r \\ s_2 \end{matrix} \tag{6.6.6}$$

$$\boldsymbol{\Sigma}_C = \overset{\begin{matrix} j+k & l & r & s_1 \end{matrix}}{\begin{bmatrix} \boldsymbol{O}_C^{(1)} & & & \\ & \boldsymbol{I}_l & & \\ & & \boldsymbol{S}_C & \\ & & & \boldsymbol{I}_{s_1} \end{bmatrix}} \begin{matrix} q-l-r-s_1 \\ l \\ r \\ s_1 \end{matrix} \tag{6.6.7}$$

式中，$\boldsymbol{S}_A = \text{diag}(\alpha_i), \boldsymbol{S}_B = \text{diag}(\beta_i), \boldsymbol{S}_C = \text{diag}(\gamma_i)$，并且

$$\alpha_i^2 + \beta_i^2 + \gamma_i^2 = 1, \quad i = s+1, s+2, \cdots, s+r \tag{6.6.8}$$

其中

$$1>\alpha_i\geqslant\alpha_{i+1}>0,\quad 0<\beta_i\leqslant\beta_{i+1}<1,\quad 1>\gamma_i\geqslant\gamma_{i+1}>0 \tag{6.6.9}$$

和

$$\frac{\alpha_i}{\beta_i\gamma_i}\geqslant\frac{\alpha_{i+1}}{\beta_{i+1}\gamma_{i+1}},\quad i=s+1,s+2,\cdots,s+r-1 \tag{6.6.10}$$

其中，$s=j+k+l$。

证明　参见文献 [499]。

类似于广义奇异值，定义

$$\begin{aligned}
&\alpha_i=1,\quad \beta_i=1,\quad \gamma_i=0,\quad i=1,2,\cdots,j\\
&\alpha_i=1,\quad \beta_i=0,\quad \gamma_i=0,\quad i=j+1,j+2,\cdots,j+k\\
&\alpha_i=1,\quad \beta_i=0,\quad \gamma_i=1,\quad i=j+k+1,j+k+2,\cdots,s\\
&\alpha_i,\beta_i,\gamma_i\ \text{取}\ \boldsymbol{S}_A,\boldsymbol{S}_B,\boldsymbol{S}_C\ \text{中的值},\quad i=s+1,s+2,\cdots,s+r\\
&\alpha_i=0,\quad \beta_i=1,\quad \gamma_i=1,\quad i=s+r+1,s+r+2,\cdots,s+r+\min\{s_1,s_2\}
\end{aligned}$$

是矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的非平凡约束奇异值。

约束奇异值分解使得可以对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 计算一个低秩近似矩阵，方法是从矩阵 $\boldsymbol{A}$ 减去一个矩阵，被减去的矩阵必须服从约束条件：它的列位于 $\boldsymbol{B}$ 的列空间，而行则位于 $\boldsymbol{C}$ 的行空间。

有必要指出，对于矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 的某些特殊选择，约束奇异值分解 (RSVD) 将简化为普通奇异值分解 (OSVD)、乘积奇异值分解 (PSVD) 和广义奇异值分解 (GSVD)。下面的定理严格地叙述了这些结果。

定理 6.6.2 约束奇异值分解的特殊情况包括 [111]

(1) 矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{I}_m,\boldsymbol{I}_n)$ 的 RSVD 就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 OSVD；

(2) 矩阵三元组 $(\boldsymbol{I}_m,\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的 RSVD 就是 $(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}},\boldsymbol{C})$ 的 PSVD；

(3) 矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{I}_n)$ 的 RSVD 就是矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的 GSVD；

(4) 矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{I}_m,\boldsymbol{C})$ 的 RSVD 就是矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{C})$ 的 GSVD。

证明 [111]　下面分别证明之。

(1) 令 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}_m$，$\boldsymbol{C}=\boldsymbol{I}_n$，并考虑矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的 RSVD。根据定理 6.6.1 有 $\boldsymbol{I}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{S}_B\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{I}_n=\boldsymbol{V}\boldsymbol{S}_C\boldsymbol{Q}^{-1}$。这意味着，$\boldsymbol{P}=\boldsymbol{S}_B\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{V}\boldsymbol{S}_C$。因此，可以求得

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{V}_B(\boldsymbol{S}_B^{-1}\boldsymbol{S}_A\boldsymbol{S}_C^{-1})\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$$

这恰好就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 OSVD。

(2) 令 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}_m$，并考虑 $(\boldsymbol{I}_m,\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的 RSVD。于是，$\boldsymbol{I}_m=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{S}_A\boldsymbol{Q}^{-1}$，这意味着 $\boldsymbol{Q}^{-1}=\boldsymbol{S}_A^{-1}\boldsymbol{P}$。因此，$\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{V}_B\boldsymbol{S}_B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}^{-1},\boldsymbol{C}=\boldsymbol{U}_C(\boldsymbol{S}_C\boldsymbol{S}_1^{-1})\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}$，这正是 $(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}},\boldsymbol{C})$ 的 PSVD。

(3) 令 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{I}_n$，并考虑 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{I}_n)$ 对称矩阵 RSVD。于是，$\boldsymbol{I}_n=\boldsymbol{U}_C\boldsymbol{S}_C\boldsymbol{Q}^{-1}$，从而 $\boldsymbol{Q}^{-1}=\boldsymbol{S}_C^{-1}\boldsymbol{U}_C^{\mathrm{H}}$。因此，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{P}^{-1}(\boldsymbol{S}_A\boldsymbol{S}_C^{-1})\boldsymbol{U}_C^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{S}_B\boldsymbol{V}_B^{\mathrm{H}}$，这就是矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的 GSVD(相差一个对角线比例因子)。

(4) 令 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{I}_m$ 后，证明与 (3) 类似。 ■

6.7 结构奇异值

作为具有结构不确定性的反馈系统的分析与综合的一种工具，Doyle 于 1982 年提出了结构奇异值 (structured singular value) 的概念 [132]。结构奇异值在 H^∞ 控制和系统特征的描述中有着重要的应用 [133],[150]。本节介绍结构奇异值的几种定义以及如何将结构奇异值的计算转换成几个光滑最优化问题的求解。

6.7.1 结构奇异值的定义与性质

对于一个正方的复矩阵 $\boldsymbol{M}$，用 $\rho(\boldsymbol{M})$ 表示其谱半径，用 $\bar{\sigma}(\boldsymbol{M})$ 表示其最大的奇异值。

任何一个由正整数组成的 m 元组 $\mathcal{K}=(k_1,k_2,\cdots,k_m)$ 称作尺度为 m 的分块结构。给定一个尺度为 m 的分块结构 $\mathcal{K}$，定义投影矩阵为

$$\boldsymbol{P}_i=\mathrm{diag}(\boldsymbol{O}_{k_1},\cdots,\boldsymbol{O}_{k_{i-1}},\boldsymbol{I}_{k_i},\boldsymbol{O}_{k_{i+1}},\cdots,\boldsymbol{O}_{k_m})$$

块对角矩阵族为

$$\boldsymbol{\mathcal{D}}=\{\mathrm{diag}(d_1\boldsymbol{I}_{k_1},\cdots,d_m\boldsymbol{I}_{k_m})\mid d_i\in(0,\infty)\}$$

和块酉矩阵族为

$$\boldsymbol{\mathcal{U}}=\{\mathrm{diag}(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2,\cdots,\boldsymbol{U}_m)\mid \boldsymbol{U}_i\ 是\ k_i\times k_i\ 酉矩阵\}$$

对于任意正标量 δ (有可能是 ∞)，我们记块对角矩阵族

$$\boldsymbol{X}_\delta=\{\mathrm{diag}(\boldsymbol{\Delta}_1,\boldsymbol{\Delta}_2,\cdots,\boldsymbol{\Delta}_m)\mid \boldsymbol{\Delta}_i\ 是满足条件\ \bar{\sigma}(\boldsymbol{\Delta}_i)\leqslant\delta\ 的\ k_i\times k_i\ 复矩阵\}$$

所有以上矩阵都具有维数 $n\times n$，其中

$$n=\sum_{j=1}^m k_j$$

定义 6.7.1 (结构奇异值) [132] 一个复值的 $n\times n$ 矩阵 M 相对于分块结构 $\mathcal{K}$ 的结构奇异值是具有以下性质的正数 μ：

$$\det(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{M}\boldsymbol{\Delta})\neq 0,\qquad \forall\boldsymbol{\Delta}\in\boldsymbol{X}_\delta$$

当且仅当

$$\mu\delta < 1$$

换言之，如果在 $\boldsymbol{X}_\infty$ 内没有满足 $\det(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{M\Delta})=0$ 的 $\boldsymbol{\Delta}$ 存在，则 $\mu(\boldsymbol{M})=0$；否则，有 $\mu(\boldsymbol{M})=(\min\limits_{\boldsymbol{\Delta}\in\boldsymbol{X}_\infty}\{\bar{\sigma}(\boldsymbol{\Delta})\mid\det(\boldsymbol{I}+\boldsymbol{M\Delta})=0\})^{-1}$。

应当注意，$\boldsymbol{P}_i,\boldsymbol{\mathcal{D}},\boldsymbol{\mathcal{U}},\boldsymbol{X}_\delta$ 和 $\mu(\boldsymbol{M})$ 均与分块结构有关。不过，在大多数情况下，并不明显规定这种分块结构。

关于结构奇异值，容易验证以下事实 [132]。

事实 1　对于所有 $\boldsymbol{U}\in\boldsymbol{\mathcal{U}}$，有

$$\mu(\boldsymbol{M})=\mu(\boldsymbol{MU})=\mu(\boldsymbol{UM})$$

并且对于所有 $\boldsymbol{D}\in\boldsymbol{\mathcal{D}}$，有

$$\mu(\boldsymbol{M})=\mu(\boldsymbol{DMD}^{-1})$$

事实 2

$$\mu(\boldsymbol{M})=\max_{\boldsymbol{U}\in\boldsymbol{\mathcal{U}}}\rho(\boldsymbol{MU})=\max_{\boldsymbol{U}\in\boldsymbol{\mathcal{U}}}\rho(\boldsymbol{UM}) \tag{6.7.1}$$

事实 3

$$\mu(\boldsymbol{M})\leqslant\inf_{\boldsymbol{D}\in\boldsymbol{\mathcal{D}}}\bar{\sigma}(\boldsymbol{DMD}^{-1}) \tag{6.7.2}$$

并且对于尺度不超过 3 的分块结构，有

$$\mu(\boldsymbol{M})=\inf_{\boldsymbol{D}\in\boldsymbol{\mathcal{D}}}\bar{\sigma}(\boldsymbol{DMD}^{-1}) \tag{6.7.3}$$

其中，inf 代表下确界。

事实 2 和 3 提供了比定义 6.7.1 更适合于计算的结构奇异值定义。然而，下面的定义将结构奇异值同光滑 (smooth) 最优化问题建立了联系，是一种更容易操作的定义。

定义 6.7.2　一个复值的 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{M}$ 相对于分块结构 $\mathcal{K}$ 的结构奇异值定义为

$$\mu(\boldsymbol{M})=\max_{\boldsymbol{x}\in C^n}\{\|\boldsymbol{Mx}\|:\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{Mx}\|=\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{Mx}\|,\ i=1,2,\cdots,m\} \tag{6.7.4}$$

或

$$\mu(\boldsymbol{M})=\max_{\boldsymbol{x}\in C^n}\{\|\boldsymbol{Mx}\|:\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{Mx}\|\leqslant\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{Mx}\|,\ i=1,2,\cdots,m\} \tag{6.7.5}$$

上述定义是由 Fan 与 Tits [150] 以定理形式证明的结果。他们还证明了，如果极大化被约束在单位球 $\{\boldsymbol{x}\in C^n\mid\|\boldsymbol{x}\|\leqslant 1\}$ 内或单位球面 $\{\boldsymbol{x}\in C^n\mid\|\boldsymbol{x}\|=1\}$ 上，定义中的两个等式仍然成立。

式 (6.7.4) 和式 (6.7.5) 的极大化结果显然不是唯一的，因为如果 $\boldsymbol{x}^*$ 是一个极大化结果的话，那么对于任何幅值为 1 的复数 θ 而言，则 $\theta\boldsymbol{x}^*$ 也是一个极大化结果。

与结构奇异值定义式 (6.7.1) 和式 (6.7.3) 相比，式 (6.7.4) 和式 (6.7.5) 中的目标函数和约束条件更方便计算；在对所有的范数取平方后，式 (6.7.4) 和式 (6.7.5) 中的目标函数和约束条件是光滑的。

6.7.2 结构奇异值的计算

现在考虑结构奇异值的计算方法。给出任一矩阵 $\boldsymbol{M}$ 和分块结构 $\mathcal{K}$，下面的算法可以构造一个简化矩阵 $\bar{\boldsymbol{M}}$，它具有与 $\boldsymbol{M}$ 相同的秩，且相应的简化分块结构 $\bar{\mathcal{K}}$ 的任一尺度都不会大于 $\boldsymbol{M}$ 的秩。

算法 6.7.1 (简化矩阵的构造算法)[150]

输入

$$\boldsymbol{M}\in C^{n\times n},\qquad \mathcal{K}=(k_1,k_2,\cdots,k_m)$$

步骤 1　实现矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的奇异值分解。令 $r=\mathrm{rank}(\boldsymbol{M})$，并令 $\boldsymbol{U}_i$ 和 $\boldsymbol{V}_i$ 均是 $k_i\times r$ 矩阵，其中，$i=1,2,\cdots,m$。又令

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_1\\\boldsymbol{U}_2\\\vdots\\\boldsymbol{U}_m\end{bmatrix}\quad 和\quad \begin{bmatrix}\boldsymbol{V}_1\\\boldsymbol{V}_2\\\vdots\\\boldsymbol{V}_m\end{bmatrix}$$

分别由 $\boldsymbol{M}$ 的前 r 个左奇异向量和右奇异向量组成。于是，对于某个正定的对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_r)$，有

$$\boldsymbol{M}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_1\\\boldsymbol{U}_2\\\vdots\\\boldsymbol{U}_m\end{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}_1\\\boldsymbol{V}_2\\\vdots\\\boldsymbol{V}_m\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}$$

步骤 2　计算 $\boldsymbol{W}^U=\mathrm{diag}(\boldsymbol{W}_1^U,\boldsymbol{W}_2^U,\cdots,\boldsymbol{W}_m^U)$ 和 $\boldsymbol{W}^V=\mathrm{diag}(\boldsymbol{W}_1^V,\boldsymbol{W}_2^V,\cdots,\boldsymbol{W}_m^V)$，这两个矩阵都在块酉矩阵族 $\boldsymbol{\mathcal{U}}$ 内，且对于 $i=1,2,\cdots,m$，矩阵 $\boldsymbol{W}_i^U\boldsymbol{U}_i$ 的最后 $(k_i-r_i^U)$ 行和 $\boldsymbol{W}_i^V\boldsymbol{V}_i$ 的最后 $(k_i-r_i^V)$ 行均为零，其中，r_i^U 和 r_i^V 分别是 $\boldsymbol{U}_i$ 和 $\boldsymbol{V}_i$ 的秩。

步骤 3　对于 $i=1,2,\cdots,m$，令 $\bar{k}_i=\max(r_i^U,r_i^V)$，并令 $\bar{\boldsymbol{U}}_i$ 和 $\bar{\boldsymbol{V}}_i$ 分别由 $\boldsymbol{W}_i^U\boldsymbol{U}_i$ 和 $\boldsymbol{W}_i^V\boldsymbol{V}_i$ 的前 $\bar{k}_i$ 行组成，则

$$\bar{\boldsymbol{M}}=\begin{bmatrix}\bar{\boldsymbol{U}}_1\\\bar{\boldsymbol{U}}_2\\\vdots\\\bar{\boldsymbol{U}}_m\end{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}\begin{bmatrix}\bar{\boldsymbol{V}}_1\\\bar{\boldsymbol{V}}_2\\\vdots\\\bar{\boldsymbol{V}}_m\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}$$

和

$$\bar{\mathcal{K}}=(\bar{k}_1,\bar{k}_2,\cdots,\bar{k}_m)$$

应当注意的是，矩阵 $\boldsymbol{W}^U$ 和 $\boldsymbol{W}^V$ 都不是唯一的。因此，只能够把 $\bar{\boldsymbol{M}}$ 视为对应于$\boldsymbol{M}$的一个简化矩阵。将矩阵 $\boldsymbol{M}$ 简化为 $\bar{\boldsymbol{M}}$ 的运算可以看做是对 $\boldsymbol{M}$ 进行一系列矩阵变换。如下面的命题所述，结构奇异值在这些变换下可保持不变。

命题 6.7.1[150]　由算法 6.7.1 构造的简化矩阵 $\bar{\boldsymbol{M}}$ 和分块结构 $\bar{\mathcal{K}}$ 满足关系

$$\mu(\boldsymbol{M})=\bar{\mu}(\bar{\boldsymbol{M}})$$

式中，$\bar{\mu}$ 表示相对于分块结构 $\bar{\mathcal{K}}$ 的结构奇异值。

作为算法 6.7.1 的一个特例，下面的定理给出了秩等于 1 的矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的结构奇异值的计算方法。

定理 6.7.1 (秩 1 矩阵的结构奇异值) [150] 假定矩阵$\boldsymbol{M}$具有秩 1，即 $\boldsymbol{M}=\boldsymbol{u}\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}$ 对 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}\in C^n$。令 $\bar{\boldsymbol{u}},\bar{\boldsymbol{v}}\in R^m$ 定义为

$$\bar{\boldsymbol{u}}=[\bar{u}_1,\bar{u}_2,\cdots,\bar{u}_m]^{\mathrm{T}}$$
$$\bar{\boldsymbol{v}}=[\bar{v}_1,\bar{v}_2,\cdots,\bar{v}_m]^{\mathrm{T}}$$

其中，$\bar{u}_i=\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{u}\|,\bar{v}_i=\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{v}\|,i=1,2,\cdots,m$，则 $\mu(\boldsymbol{M})=\bar{\boldsymbol{u}}^{\mathrm{T}}\bar{\boldsymbol{v}}$。

将式 (6.7.5) 视为一个在实向量空间 R^{2n} 的最优化问题。令 $\boldsymbol{z}=\begin{bmatrix}\mathrm{Re}\ \boldsymbol{x}\\ \mathrm{Im}\ \boldsymbol{x}\end{bmatrix}\in R^{2n}$，则式 (6.7.5) 中关于 $\boldsymbol{z}$ 的约束条件可以写作

$$g_i(\boldsymbol{z})=\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{x}\|^2\|\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}\|^2-\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}\|^2\leqslant 0,\qquad i=1,2,\cdots,m$$

定义 6.7.3 (正则点)[150] 对于任意 $\boldsymbol{x}\in C^n$，若与之对应的 $\boldsymbol{z}\in R^{2n}$ 使得 $\{\nabla g_i(\boldsymbol{z}),i=1,2,\cdots,m\}$ 组成一个在整个实数域都线性无关的向量集合，则称该 $\boldsymbol{x}$ 是式 (6.7.4) 的一个正则点。

对于一般的矩阵，其结构奇异值与最优化问题之间存在下列关系。

定理 6.7.2[150] 考虑下面三个最优化问题 (定义 6.7.2，事实 3，事实 2)：

(P1) $\mu(\boldsymbol{M})=\max\limits_{\boldsymbol{x}\in C^n}\{\|\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}\|:\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{x}\|\|\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}\|=\|\boldsymbol{P}_i\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}\|,\ i=1,2,\cdots,m\}$

(P2) $\inf\limits_{\boldsymbol{D}\in\mathcal{D}}\delta(\boldsymbol{D}\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{-1})$

(P3) $\max\limits_{\boldsymbol{U}\in\mathcal{U}}\rho(\boldsymbol{M}\boldsymbol{U})$

并假定：① $\boldsymbol{x}^*$ 是形如 $\theta\boldsymbol{x}^*$ 的优化问题 (P1) 的唯一全局解，其中，θ 是一个单位幅值的复数，而 $\boldsymbol{x}^*$ 是 (P1) 的正则点；②式 (6.7.3) 成立；③ (P2) 中的下确界"inf"能够达到。在这些条件下，以下结果成立：

(1) 假定 $\boldsymbol{D}^*\in\mathcal{D}$ 是问题 (P2) 的解，则存在一个与 $\boldsymbol{D}^*\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{*-1}$ 的最大奇异值相对应的右奇异向量 (例如 $\boldsymbol{y}$) 使得 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{D}^{*-1}\boldsymbol{y}^*)/\|\boldsymbol{D}^{*-1}\boldsymbol{y}^*\|$ 是问题 (P1) 的解。

(2) 令 $\boldsymbol{\lambda}^*=[\lambda_1^*,\lambda_2^*,\cdots,\lambda_m^*]^{\mathrm{T}}$ 是与 $\boldsymbol{x}^*$ 相关联的 (唯一) 乘数向量，则块对角矩阵 $\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(\lambda_i^{*1/2}\boldsymbol{I}_{k_i})$ 属于 $\mathcal{D}$，并且 $\boldsymbol{D}$ 是问题 (P2) 的唯一解 (除了相差一个标量乘数外)。

(3) 对于 $i=1,2,\cdots,m$，令 $\boldsymbol{Q}_i$ 为 $k_i\times n$ 矩阵，它由 $\boldsymbol{P}_i$ 从 $\sum\limits_{j=1}^{i-1}k_j+1$ 到 $\sum\limits_{j=1}^{i}k_j$ 的所有行组成。也就是说，$\boldsymbol{Q}_i$ 是 $\boldsymbol{P}_i$ 的第 i 个行分块。令 $\boldsymbol{U}=\mathrm{diag}(\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2,\cdots,\boldsymbol{U}_m)$，式中，$\boldsymbol{U}_i(i=1,2,\cdots,m)$ 是 $k_i\times k_i$ 矩阵，并满足 $\boldsymbol{U}_i=\boldsymbol{V}_i\boldsymbol{W}_i^{\mathrm{H}}$，其中，$\boldsymbol{V}_i$ 和 $\boldsymbol{W}_i$ 是两个酉矩阵，它们的第 1 列分别为 $\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{x}^*/\|\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{x}^*\|$ 和 $\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}^*/\|\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}^*\|$，若 $\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{x}^*\neq 0$。此时，$\boldsymbol{U}$ 是问题 (P3) 的解。

(4) 假定 $\boldsymbol{U}^*\in\mathcal{U}$ 是问题 (P3) 的解，则对于矩阵 $\boldsymbol{M}\boldsymbol{U}^*$ 与幅值等于谱半径的特征值相对应的任一单位范数的特征向量 $\boldsymbol{z}^*$，向量 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{U}^*\boldsymbol{z}$ 是问题 (P1) 的解。

现在假定定理 6.7.2 中的假设条件都满足，并假定已得到问题 (P1) 的一个候补解 $\boldsymbol{x}^*$ 或问题 (P3) 的一个候补解 $\boldsymbol{U}^*$，但是不能够肯定 $\mu(\boldsymbol{M})$ 是否已获得，也就是说，不能够肯定 $\boldsymbol{x}^*$ 或 $\boldsymbol{U}^*$ 是否就是全局极大化结果。下面的算法提供了一种计算结构奇异值 $\mu(\boldsymbol{M})$ 的合理方法。

算法 6.7.2 (结构奇异值计算算法) [150]

步骤 1　如果$\boldsymbol{M}$具有秩 1，则按照定理 6.7.1 求 $\mu(\boldsymbol{M})$，算法即告完成。若对某个 i，$\boldsymbol{M}$ 的秩小于 k_i，就利用算法 6.7.1 计算 $\boldsymbol{M}$ 的简化矩阵 $\bar{\boldsymbol{M}}$，并再次用$\boldsymbol{M}$和 $\mathcal{K}$ 表记简化后的矩阵和分块结构。

步骤 2　求解问题 (P1)，得到 (可能是局部的) 极大化变量 $\hat{\boldsymbol{x}}$。

步骤 3　按照定理 6.7.2 中的 (2)，由 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 计算 $\hat{\boldsymbol{D}}$。如果 $\|\boldsymbol{M}\hat{\boldsymbol{x}}\| = \bar{\sigma}(\hat{\boldsymbol{D}}\boldsymbol{M}\hat{\boldsymbol{D}}^{-1})$，则取 $\mu(\boldsymbol{M}) = \|\boldsymbol{M}\hat{\boldsymbol{x}}\|$，算法属成功完成[1]。

步骤 4　求解 (P2) 问题，得到 $\boldsymbol{D}^*$，它是全局极小化变量[2]。

步骤 5　如果 $\max(\rho(\boldsymbol{M}), \|\boldsymbol{M}\hat{\boldsymbol{x}}\|) = \bar{\sigma}(\boldsymbol{D}^*\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{*-1})$，则取 $\mu(\boldsymbol{M}) = \bar{\sigma}(\boldsymbol{D}^*\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{*-1})$，算法成功完成[3]。否则，$\mu(\boldsymbol{M})$ 的搜寻失败。

显然，如果定理 6.7.2 的条件均满足，而且算法 6.7.2 成功完成时，算法将给出正确的结构奇异值。

前面几节介绍了奇异值分解及其各种推广。最后再叙述一种奇异值分解。它是 Takagi 早在 1925 年提出的对称复矩阵的奇异值分解 [439]，现在习惯上称之为 Takagi 奇异值分解。

定理 6.7.3 (Takagi 奇异值分解)　若 $\boldsymbol{A}$ 是一个对称复矩阵，则存在一个酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和一个非负对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)$ 使得

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$$

其中，$\boldsymbol{U}$ 的列是矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的特征向量的正交集，并且与之对应的 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的对角线元素是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的对应特征值的非负平方根。

6.8　奇异值分解的应用

前面几节定义了奇异值分解以及各种推广的奇异值分解，并分析了它们的性质。从这一节开始，我们介绍它们的一些重要应用。

奇异值分解已广泛应用于许多工程问题的解决中。例如，仅奇异值分解与信号处理的国际学术专题讨论会的论文集就有多部 (例如文献 [319]，文献 [183] 等)。本节选择系统辨识和信号处理中的几个典型例子介绍奇异值分解的应用。

---

1 如果 $\hat{\boldsymbol{D}}$ 内的任一对角元素为 0，则用 ϵ 代替，并使用 $\hat{\boldsymbol{D}}(\epsilon)\boldsymbol{M}\hat{\boldsymbol{D}}(\epsilon)^{-1}$ 代替 $\hat{\boldsymbol{D}}\boldsymbol{M}\hat{\boldsymbol{D}}^{-1}$。

2 这里，0 和 ∞ 都被看做是 $\boldsymbol{D}^*$ 内元素的可接受的值。

3 如果 $\boldsymbol{D}^*$ 内的任何元素为无穷大，则用 $1/\epsilon$ 代替。还需要注意，若式 (6.7.3) 成立，但定理 6.7.2 中的其他条件之一不满足时，有 $\|\boldsymbol{M}\hat{\boldsymbol{x}}\| = \bar{\sigma}(\boldsymbol{D}^*\boldsymbol{M}\boldsymbol{D}^{*-1})$。

6.8.1 静态系统的奇异值分解

以电子器件为例，我们来考虑静态系统的奇异值分解。假定某电子器件的电压 v 和电流 i 之间存在下列关系 (即静态系统模型为)：

$$\underbrace{\begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}}_{F} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ i_1 \\ i_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{6.8.1}$$

矩阵 $\boldsymbol{F}$ 的元素限定取 v_1, v_2, i_1, i_2 的允许值。

如果所用的电压和电流测量装置具有相同的精度 (比如 1%)，那么我们就可以很容易检测任何一组测量值是或不是式 (6.8.1) 在期望的精度范围内的解。假定用各种方法得到另外一个矩阵表达式：

$$\begin{bmatrix} 1 & -1 & 10^6 & 10^6 \\ 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ i_1 \\ i_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \tag{6.8.2}$$

显然，只有当电流非常精确测量时，一组 v_1, v_2, i_1, i_2 测量值才会以合适的精度满足式 (6.8.2)；而对于电流测量有 1% 的测量误差的一般情况，式 (6.8.2) 与静态系统模型 (6.8.1) 是大相径庭的：式 (6.8.1) 给出的电压关系为 $v_1 - v_2 = 0$，而由于 $i_1 + i_2 = 0.01$ 的测量误差，式 (6.8.2) 给出的电压关系则是 $v_1 - v_2 + 10^4 = 0$。然而，从代数的角度看，式 (6.8.1) 和式 (6.8.2) 是完全等价的。因此，我们希望能够有某些手段来比较几种代数等价的模型表示，以确定哪一个是我们所希望的、适用一般而不是特殊情况的通用静态系统模型。解决这个问题的基本数学工具就是奇异值分解。

更一般地，我们考虑 n 个电阻的静态系统方程 [88]：

$$\boldsymbol{F} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{i} \end{bmatrix} = 0 \tag{6.8.3}$$

式中，$\boldsymbol{F}$ 是一个 $m \times n$ 矩阵。为了简化表示，我们将一些不变的补偿项撤去了。这样一种表达式是非常通用的，它可以来自某些物理装置 (例如线性化的物理方程) 和网络方程。矩阵 $\boldsymbol{F}$ 对数据的精确部分和非精确部分的作用可以利用奇异值分解来进行分析。令 $\boldsymbol{F}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{F} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{V} \tag{6.8.4}$$

于是，精确部分和非精确部分的各个分量被矩阵 $\boldsymbol{F}$ 的奇异值 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_r, 0, \cdots, 0$ 作不同的大小改变。如果式 (6.8.3) 是物理装置设计的准确规格，那么矩阵 $\boldsymbol{F}$ 的奇异值分解将提供一个代数等价，但在数值上却最可靠的设计方程。注意到 $\boldsymbol{U}$ 是一正交矩阵，所以由式 (6.8.3) 和式 (6.8.4) 有

$$\boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{V} \begin{bmatrix} \boldsymbol{v} \\ \boldsymbol{i} \end{bmatrix} = \boldsymbol{0} \tag{6.8.5}$$

若将对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 分块为

$$\boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$$

并将正交矩阵 $\boldsymbol{V}$ 作相应的分块，即

$$\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}$$

其中，$[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]$ 是 $\boldsymbol{V}$ 最上面的 r 行，则式 (6.8.5) 可以写作

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}v\\ i\end{bmatrix}=\boldsymbol{0}$$

从而，我们可以得到与式 (6.8.3) 在代数上等价，但在数值上却最可靠的表达式：

$$[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]\begin{bmatrix}v\\ i\end{bmatrix}=\boldsymbol{0} \tag{6.8.6}$$

如果式 (6.8.3) 是物理装置的不精确模型，则对角矩阵的对角线上就不会出现零奇异值。这时，我们就不能够直接使用式 (6.8.6)。在这种情况下，我们需要对模型进行修正，方法是令所有奇异值 $\sigma_s,\sigma_{s+1},\cdots$ 等于零，其中，s 是满足 σ_s/σ_1 小于矩阵 $\boldsymbol{F}$ 的元素所允许的精确度 (即物理装置的测量精确度) 的最小整数。于是，式 (6.8.6) 中的 $[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]$ 修正为 $\boldsymbol{V}$ 的最上面 $s-1$ 行。有关结果表明，这样一种修正可以使参数的变化限制在预先设定的误差范围内 [88]。

现在考虑一个电阻性的多端对 (电阻、电导、混合参数、传导和散射等) 的不同表达式，目的是寻找一个尽可能最优的表达式。例如，使用端对坐标 x 和 y 时，电阻性多端对的显式表示则为 [88]

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\qquad \begin{bmatrix}\boldsymbol{y}\\ \boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\boldsymbol{\Omega}\begin{bmatrix}v\\ i\end{bmatrix} \tag{6.8.7}$$

通过选择合适的坐标变换 $\boldsymbol{\Omega}$，就可以得到电阻、电导、任意混合参数或传导的表达式。于是，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的条件数就代表从 $\boldsymbol{x}$ 到 $\boldsymbol{y}$ 的信噪比放大倍数的上限。如果 $\boldsymbol{A}$ 可逆，则该条件数也是从 $\boldsymbol{y}$ 到 $\boldsymbol{x}$ 的信噪比放大倍数的上限。因此，不同的表达式就可以根据它们的条件数进行排队。这就使得所有参数化表达式一目了然。显然，最优的情况是条件数 $\text{cond}(\boldsymbol{A})=1$ 或 $\boldsymbol{A}$ 是一正交矩阵 (包含一比例因子)。一个自然会问的问题是，任何一个多端对的电阻器是否有一个最优的表达式？也就是说，是否存在使得 $\text{cond}(\boldsymbol{A})=1$ 的正交矩阵 $\boldsymbol{A}$？为此，让我们来看一个 n 维 n 端对的电阻器的隐含表达式：

$$\boldsymbol{F}\begin{bmatrix}v\\ i\end{bmatrix}=\boldsymbol{0},\qquad \text{rank}(\boldsymbol{F})=n \tag{6.8.8}$$

应用 $\boldsymbol{F}$ 的奇异值分解式 (6.8.4)，即可得到式 (6.8.6)，其中，$r=n$。选择正交坐标变换

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{y}\\ \boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}/\sqrt{2} & \boldsymbol{I}/\sqrt{2}\\ -\boldsymbol{I}/\sqrt{2} & \boldsymbol{I}/\sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\Omega}}\begin{bmatrix}v\\ i\end{bmatrix} \tag{6.8.9}$$

这样一来，就可以利用 $\boldsymbol{\Omega}$ 的正交性 $\boldsymbol{\Omega}^{-1}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$，将隐含表达式 (6.8.6) 表示成

$$[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{v}\\ \boldsymbol{i}\end{bmatrix}=[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}/\sqrt{2} & -\boldsymbol{I}/\sqrt{2}\\ \boldsymbol{I}/\sqrt{2} & \boldsymbol{I}/\sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{y}\\ \boldsymbol{x}\end{bmatrix}$$
$$=[\boldsymbol{I},\boldsymbol{O}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}/\sqrt{2} & -\boldsymbol{I}/\sqrt{2}\\ \boldsymbol{I}/\sqrt{2} & \boldsymbol{I}/\sqrt{2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{y}\\ \boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\boldsymbol{0}$$

即有

$$[\boldsymbol{I}/\sqrt{2},\ -\boldsymbol{I}/\sqrt{2}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{y}\\ \boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\boldsymbol{0}\ \Rightarrow\ \boldsymbol{y}=\boldsymbol{x} \tag{6.8.10}$$

于是，可以得出结论：利用式 (6.8.4) 的奇异值分解可以得到式 (6.8.9) 的正交变换，而通过此正交变换，即可得到一个在数值上最优的显式关系 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}$。

6.8.2 系统辨识

考虑时不变、线性离散时间的多变量系统，它具有状态空间表示：

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{x}(k+1)&=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(k)+\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}(k)\\ \boldsymbol{y}(k)&=\boldsymbol{C}\boldsymbol{x}(k)+\boldsymbol{D}\boldsymbol{u}(k)\end{aligned}\right\} \tag{6.8.11}$$

式中，$\boldsymbol{u}(k),\boldsymbol{y}(k)$ 和 $\boldsymbol{x}(k)$ 分别表示在时间 k 的输入向量，输出向量和状态向量，且向量 $\boldsymbol{x}(k)$ 的维数是最小的系统阶数 n；$\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{D}$ 是待辨识的未知系统矩阵。系统辨识问题的提法是，只利用观测到的输入/输出数据 $u_k,u_{k+1},\cdots$ 和 $y_k,y_{k+1},\cdots$ 辨识系统矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{D}$。

Moonen 等人业已证明 [319]，状态向量序列可以仅根据输入/输出观测值计算如下：令 $\boldsymbol{H}_1$ 和 $\boldsymbol{H}_2$ 定义为

$$\boldsymbol{H}_1=\begin{bmatrix}u_k & u_{k+1} & \cdots & u_{k+j-1}\\ y_k & y_{k+1} & \cdots & y_{k+j-1}\\ u_{k+1} & u_{k+2} & \cdots & u_{k+j}\\ y_{k+1} & y_{k+2} & \cdots & y_{k+j}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ u_{k+i-1} & u_{k+i} & \cdots & u_{k+j+i-2}\\ y_{k+i-1} & y_{k+i} & \cdots & y_{k+j+i-2}\end{bmatrix} \tag{6.8.12}$$

$$\boldsymbol{H}_2=\begin{bmatrix}u_{k+i} & u_{k+i+1} & \cdots & u_{k+i+j-1}\\ y_{k+i} & y_{k+i+1} & \cdots & y_{k+i+j-1}\\ u_{k+i+1} & u_{k+i+2} & \cdots & u_{k+i+j}\\ y_{k+i+1} & y_{k+i+2} & \cdots & y_{k+i+j}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ u_{k+2i-1} & u_{k+2i} & \cdots & u_{k+2i+j-2}\\ y_{k+2i-1} & y_{k+2i} & \cdots & y_{k+2i+j-2}\end{bmatrix} \tag{6.8.13}$$

其中，$j\geqslant 2(m+l)i$，并定义状态向量序列

$$\boldsymbol{x}=[x_{k+i},x_{k+i+1},\cdots,x_{k+i+j-1}]$$

则在一定条件下，有

$$\mathrm{Span}_{\mathrm{row}}(\boldsymbol{x}) = \mathrm{Span}_{\mathrm{row}}\boldsymbol{H}_1) \cap \mathrm{Span}_{\mathrm{row}}(\boldsymbol{H}_2)$$

因此，此交集的任何基都组成一个合适的状态向量序列 $\boldsymbol{x}$，它具有与相邻行向量相同的基向量。

一旦 $\boldsymbol{x} = [x_{k+i}, x_{k+i+1}, \cdots, x_{k+i+j-1}]$ 已知，则系统矩阵可以通过求解 (超定的) 线性方程组

$$\begin{bmatrix} x_{k+i+1} & \cdots & x_{k+i+j-1} \\ y_{k+i} & \cdots & y_{k+i+j-2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_{k+i} & \cdots & x_{k+i+j-2} \\ u_{k+i} & \cdots & x_{k+i+j-2} \end{bmatrix}$$

辨识。

上述结果构成了两步辨识方法的核心。

第一步，由 $\boldsymbol{H}_1$ 和 $\boldsymbol{H}_2$ 张成的行空间的交集可以通过级联矩阵 $\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{H}_1 \\ \boldsymbol{H}_2 \end{bmatrix}$ 的奇异值分解求出，即

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{U}_H \boldsymbol{\Sigma}_H \boldsymbol{V}_H^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{U}_{11} & \boldsymbol{U}_{12} \\ \boldsymbol{U}_{21} & \boldsymbol{U}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \boldsymbol{V}_H^{\mathrm{T}}$$

其中

$$\begin{aligned} \dim(\boldsymbol{U}_{11}) &= (mi + li) \times (2mi + n) \\ \dim(\boldsymbol{U}_{12}) &= (mi + li) \times (2li - n) \\ \dim(\boldsymbol{U}_{21}) &= (mi + li) \times (2mi + n) \\ \dim(\boldsymbol{U}_{22}) &= (mi + li) \times (2li - n) \\ \dim(\boldsymbol{\Sigma}_{11}) &= (2mi + n) \times (2mi + n) \end{aligned}$$

根据

$$\boldsymbol{U}_{12}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_1 = -\boldsymbol{U}_{22}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_2$$

可以得出结论：$\boldsymbol{U}_{12}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_1$ 等于所需要的交集。然而，$\boldsymbol{U}_{12}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{H}_1$ 包含有 $2li - n$ 个行向量，其中，只有 n 个 (交集的维数) 是线性无关的。因此，需要选择这些行向量的适当组合。

第二步，由于 $\boldsymbol{U}_{12}$ 和 $\boldsymbol{U}_{22}$ 构成一个正交矩阵，所以它们可以奇异值分解为 [184]

$$\boldsymbol{U}_{12} = [\boldsymbol{U}_{12}^{(1)}, \boldsymbol{U}_{12}^{(2)}, \boldsymbol{U}_{12}^{(3)}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_{(li-n)\times(li-n)} & & \\ & \boldsymbol{C}_{n\times n} & \\ & & \boldsymbol{O}_{(li-n)\times(li-n)} \end{bmatrix} \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{U}_{22} = [\boldsymbol{U}_{22}^{(1)}, \boldsymbol{U}_{22}^{(2)}, \boldsymbol{U}_{22}^{(3)}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{O}_{(li-n)\times(li-n)} & & \\ & \boldsymbol{S}_{n\times n} & \\ & & \boldsymbol{I}_{(li-n)\times(li-n)} \end{bmatrix} \boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$$

其中

$$\begin{aligned} \boldsymbol{C} &= \mathrm{diag}(c_1, \cdots, c_n) \\ \boldsymbol{S} &= \mathrm{diag}(s_1, \cdots, s_n) \\ \boldsymbol{I}_{n\times n} &= \boldsymbol{C}^2 + \boldsymbol{S}^2 \end{aligned}$$

于是，$\boldsymbol{U}_{12}^{(1)}$ 构成 $\boldsymbol{H}_1$ 的 $(li-n)$ 维正交补。显然，只有 $\boldsymbol{U}_{12}^{(2)}$ 组成交集计算的有用组合，因而可以取

$$\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{U}_{12}^{(2)})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H}_1$$

上述两步方法是一种双重奇异值分解辨识算法，即所需要的交集先后简化为 $\boldsymbol{H}$ 和 $\boldsymbol{U}_{12}$ 两个矩阵的奇异值分解。

6.8.3 阶数确定

考虑线性移不变的平稳随机自回归 – 滑动平均 (ARMA) 过程 $\{x(n)\}$：

$$x(n)+\sum_{i=1}^{p}a(i)x(n-i)=\sum_{j=0}^{q}b(j)e(n-j),\qquad e(n)\sim \mathrm{IID}(0,\sigma_e^2) \tag{6.8.14}$$

式中，$e(n)\sim \mathrm{IID}(0,\sigma_e^2)$ 表示 $\{e(n)\}$ 是独立同分布的随机过程，其均值为 0，方差等于 σ_e^2。令 $R(\tau)=E\{x(n)x^*(n+\tau)\}$ 是 $x(n)$ 的自相关函数。我们的目的是只根据观测数据确定 ARMA 模型的自回归 (AR) 阶次 p 和滑动平均 (MA) 阶次 q。

确定 ARMA 模型阶次的方法已提出不少。归纳起来，可以分为两大类：信息量准则法和线性代数法。

信息量准则法有著名的 AIC 准则，最终预测误差 (FPE) 准则，最小描述长度 (MDL) 准则，准则自回归传递 (CAT) 准则和 BIC (AIC 的改进) 准则等，有关这些准则的详细综合介绍可在文献 [524, pp.90~91] 中找到。

典型的线性代数定阶法有行列式检验算法 [85]、Gram-Schmidt 正交法 [76] 和奇异值分解法 [70],[506],[507]：

(1) 行列式检验法检验不同维数的行列式的值，以行列式等于零时的最小维数作为阶数的估计。

(2) Gram-Schmidt 正交法则检验与 ARMA 模型服从的法方程对应的矩阵的列之间的线性无关性，以线性无关的列数作为阶数的估计。

(3) 奇异值分解法确定与 ARMA 模型服从的法方程对应的矩阵的有效秩，并用它作阶数的估计。

从数值稳定性看，前两种方法都明显比奇异值分解方法差。

对于式 (6.8.14) 的 ARMA 模型，下列著名的修正 Yule-Walker (MYW) 方程成立 (参见文献 [524])：

$$\sum_{i=1}^{p}a(i)R(\tau-i)=0,\qquad i>q \tag{6.8.15}$$

利用 MYW 方程，Cadzow 证明了以下结果 [70]。

命题 6.8.1 记 $t\times(p_e+1)$ 矩阵

$$\boldsymbol{R}_e=\begin{bmatrix}R(q_e+1) & R(q_e) & \cdots & R(q_e-p_e+1)\\ R(q_e+2) & R(q_e+1) & \cdots & R(q_e-p_e+2)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ R(q_e+t) & R(q_e+t-1) & \cdots & R(q_e-p_e+t)\end{bmatrix} \tag{6.8.16}$$

其中，$t \geqslant p_e$。若 $p_e \geqslant p, q_e \geqslant q$，且 $q_e - p_e \geqslant q - p$，则 $\text{rank}(\boldsymbol{R}_e) = p$。

这一结果给出了一种确定 ARMA 模型式 (6.8.14) 的 AR 阶数 p 的方法。理论自相关函数 $R(\tau)$ 用其样本估计值 $\hat{R}(\tau) = \dfrac{1}{N}\sum_{n=1}^{N-\tau} x(n)x(n+\tau)$ 代替后，样本自相关矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}_e$ 的有效秩即给出 AR 阶数 p 的估计，而 $\hat{\boldsymbol{R}}_e$ 的有效秩可以利用 $\hat{\boldsymbol{R}}_e$ 的奇异值分解来确定。顺便指出，选择满足 $p_e \geqslant p, q_e \geqslant q$ 和 $q_e - p_e \geqslant q - p$ 的扩展阶 p_e 和 q_e 并不困难，因为不失一般性，通常可以假定 $q \leqslant p$，此时可以直接选择 $p_e = q_e \gg p$。

在确定出 AR 阶数 p 后，MA 阶数 q 也可以利用 SVD 确定。利用 SVD 确定 ARMA 模型式 (6.8.14) 的 MA 阶数有两种方法，由 Zhang X. D. 与 Zhang Y. S. [506],[507] 提出。两种方法的主要区别在于第一种方法只需要使用 AR 阶次 p，而无需使用 ARMA 模型的任何其他参数；第二种方法则要用到 AR 阶次 p 和 AR 参数 $a(i), i = 1, 2, \cdots, p$。

下面介绍这两种方法。

1. 搜索法

这一方法 [506] 利用了这样一个事实：MA 阶数 q 的信息隐含在另外一个自相关矩阵内，该矩阵可以看作是 $\boldsymbol{R}_e$ 的增广矩阵。更严格地，这一事实可叙述为下面的命题。

命题 6.8.2 [506] 令 $\boldsymbol{R}_1$ 是一个由下式定义的 $(p+1)\times(p+1)$ 维矩阵：

$$\boldsymbol{R}_1 = \begin{bmatrix} R(q) & R(q-1) & \cdots & R(q-p) \\ R(q+1) & R(q) & \cdots & R(q-p+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R(q+p) & R(q+p-1) & \cdots & R(q) \end{bmatrix} \tag{6.8.17}$$

若 $a_p \neq 0$，则 $\text{rank}(\boldsymbol{R}_1) = p+1$。

上述结果应用起来是不方便的，因为它要用到待确定的 MA 阶次 q。幸运的是，我们很容易把它推广到具有扩展阶 $q_e > q$ 的矩阵去。

命题 6.8.3 [506] 假定 p 已经确定出，且 $q_e \geqslant q$，并令 $\boldsymbol{R}_{1e}$ 是一个 $(p+1)\times(p+1)$ 维矩阵，且

$$\boldsymbol{R}_{1e} = \begin{bmatrix} R(q_e) & R(q_e-1) & \cdots & R(q_e-p) \\ R(q_e+1) & R(q_e) & \cdots & R(q_e-p+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R(q_e+p) & R(q_e+p-1) & \cdots & R(q_e) \end{bmatrix} \tag{6.8.18}$$

则当 $q_e > q$ 时，$\text{rank}(\boldsymbol{R}_{1e}) = p$，而且仅当 $q_e = q$ 时才有 $\text{rank}(\boldsymbol{R}_{1e}) = p+1$。

显然，真实的 MA 阶数 q 隐含在 $\boldsymbol{R}_{1e}$ 内。理论上，阶数 q 可以这样来确定：从某个阶数 $Q = q_e > q$ 开始，用 SVD 检验 $\boldsymbol{R}_{1e}$ 的秩，然后依次减小一阶 $(Q \leftarrow Q-1)$ 进行新的检验。秩从 p 变为 $p+1$ 的第一个转折点发生在 $Q = q$ 处。然而，在实际应用中，由于只能使用样本自相关估计值，所以阶数从 p 变为 $p+1$ 的转折点往往不是很明显。为了发展一种 MA 定阶的实际算法，可以使用“超定的”矩阵 $\boldsymbol{R}_{2e}$，其元素 $\boldsymbol{R}_{2e}[i,j] = \hat{R}(q_e + i - j), i = 1, 2, \cdots, t,\ j = 1, 2, \cdots, p_e + 1 (t \gg p_e)$，这意味着使用更多的

样本自相关函数。容易验证：

$$\text{rank}(\boldsymbol{R}_{2e}) = \text{rank}(\boldsymbol{R}_{1e})$$

因为 $\boldsymbol{R}_{2e}$ 包含了整个 $\boldsymbol{R}_{1e}$，另根据修正 Yule-Walker 方程 (6.8.15)，任意第 $k(\geqslant p+2)$ 行 (或列) 与其上面 p 行 (或左边 p 列) 线性相关。

下面是 MA 定阶的搜索方法。

步骤 1 用 SVD 确定 AR 阶次 p，并取 $Q = q_e > q$。

步骤 2 $Q \leftarrow Q-1$，并利用样本自相关函数构造样本自相关矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}_{2e}$，计算其 SVD。

步骤 3 如果第 $(p+1)$ 个奇异值与上次计算结果相比，有一个明显的转折，则选取 $q = Q$；否则返回步骤 2，并重复以上步骤，直到 q 被选出。

定阶算法的关键是在步骤 3 中选择第 $(p+1)$ 个奇异值的转折点。作为转折检验法则，可以采用检验该奇异值前后的相对变化率

$$\alpha = \frac{\sigma_{p+1}^{Q} - \sigma_{p+1}^{Q+1}}{\sigma_{p+1}^{Q+1}}$$

是否大于某个预先设定的阈值的方法。若 α 大于该阈值，则接受此 Q 值为转折点。

2. *拟合残差法*

这种 MA 定阶方法需要使用 AR 阶次 p 和 AR 参数 $a(i), i=1,2,\cdots,p$ (有关 AR 参数估计的 SVD-TLS 方法，将在下一章介绍)。构造拟合残差

$$f(\tau) = \sum_{i=0}^{p} a(i)R(\tau - i) \tag{6.8.19}$$

根据 MYW 方程易知

$$f(\tau)\begin{cases} \neq 0, & \tau = 0,1,\cdots,q \\ = 0, & \tau = q+1, q+2, \cdots \end{cases} \tag{6.8.20}$$

原理上，MA 阶次 q 是满足 $f(\tau) \equiv 0$ 的最小整数 τ。然而，在实际应用中，由于根据 AR 参数估计值和样本自相关函数计算的 $\hat{f}(\tau)$ 值存在比较大的误差，所以直接根据 $\hat{f}(\tau) \approx 0$ 确定 q 是一种数值鲁棒性差的定阶方法。文献 [507] 提出利用拟合残差构造一特殊矩阵，该矩阵的秩直接给出 q，因此无需计算多个自相关矩阵的 SVD。

方法是简单的。容易看出三角矩阵

$$R_q = \begin{bmatrix} f(q) & f(q-1) & \cdots & f(0) \\ 0 & f(q) & \cdots & f(1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f(q) \end{bmatrix} \tag{6.8.21}$$

是满秩的，其秩等于 $q+1$，因为对角线元素 $f(q) \neq 0$。与搜索法类似，也可以构造一个

$(q_e+1)\times(q_e+1)$ 扩展阶矩阵

$$R_{qe}=\begin{bmatrix} f(q_e) & f(q_e-1) & \cdots & f(0) \\ 0 & f(q_e) & \cdots & f(1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & f(q_e) \end{bmatrix} \tag{6.8.22}$$

它的元素不再含有未知的 q，但矩阵的秩却仍然等于 $q+1$。

利用式 (6.8.20) 容易证明，$\text{rank}(\boldsymbol{R}_{qe})=\text{rank}(\boldsymbol{R}_q)=q+1$。因此，利用 SVD 确定出相应的样本残差矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}_{qe}$ 的有效秩后，即可直接得到 MA 阶次 q。有趣的是，确定矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}_{qe}$ 的秩显然等价于检验对角线元素乘积 (PODE) 是否等于零，即

$$f^{\tau+1}(\tau)\begin{cases}\neq 0, & \tau=q \\ \equiv 0, & \tau=q+1,q+2,\cdots\end{cases}$$

具体说来，PODE 试验就是选择使 $f^{\tau+1}(\tau)\equiv 0$ 的最小整数作为 MA 阶次 q 的估计。PODE 试验明显地比直接检验式 (6.8.20) 具有更好的数值鲁棒性。SVD 方法和 PODE 实验还可综合起来使用，这样可以进一步提高 MA 阶数确定的数值鲁棒性，详见文献 [507]。

顺便指出，上述使用自相关函数确定 AR 和 MA 阶次的方法仅适用于因果最小相位的 ARMA 过程。对于非最小相位系统，应该使用高阶累积量定阶和参数估计。基于高阶累积量确定 AR 和 MA 阶数的 SVD 方法分别由文献 [171] 和 [507] 提出。对这两种方法感兴趣的读者也可参考文献 [521]。文献 [507] 和 [521] 还介绍了使用 SVD 定阶方法进行高斯和非高斯过程识别，以及在 SVD 定阶方法在 AR，MA 和 ARMA 模型辨别中的应用。

6.8.4 系统的可控性

考查线性系统

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t)+\boldsymbol{b}u(t),\quad \boldsymbol{x}(0)=\boldsymbol{x}_0$$

其中，$\boldsymbol{A}\in R^{n\times n}$, $\boldsymbol{b}\in R^n$, $\boldsymbol{x}_0\in R^n$。我们的问题是求控制函数 $u(t)$，使 $\boldsymbol{x}(T)=\boldsymbol{x}_T$ (其中，$\boldsymbol{x}_T\in R^n$) 是某个希望的“状态”，即我们希望系统在 $T>0$ 时处于某种状态。显然，这有可能是不能实现的。例如，若 $\boldsymbol{b}=\boldsymbol{0}$，则将无法像希望的那样对 $\boldsymbol{x}$ 向量加以控制。更一般地，如果上述问题有解，则 $\boldsymbol{b}$ 在可以用 $\boldsymbol{A}$ 的特征系统定义的方向上不得是秩亏缺的。有多种方法可以描述一个系统 S 的“可控性”，例如

(1) 系统 S 是可控的，当且仅当 $\boldsymbol{W}_1=[\boldsymbol{b},\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{b},\ \boldsymbol{A}^2\boldsymbol{b},\ \cdots,\ \boldsymbol{A}^{n-1}\boldsymbol{b}]$ 非奇异。

(2) 系统 S 是可控的，当且仅当 $\boldsymbol{W}_2=\int_0^{\mathrm{T}}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}t}\mathrm{d}t$ 非奇异。

它们是“0-1”或“是非”描述方法。直觉告诉我们，如果 $\boldsymbol{W}_1$ 或 $\boldsymbol{W}_2$ 接近奇异，那么 S 必然“难于”控制。这种情况很容易用奇异值进行分析。可以用 $\boldsymbol{W}_1$ 或 $\boldsymbol{W}_2$ 的最小奇异值作为系统 S 非可控的测度。在鲁棒系统的设计中，度量系统非可控的测度起着重要的作用。关于数值线性代数在控制理论中的作用的精彩解说可在文献 [350], [516] 中找到。

6.8.5 图像压缩

奇异值分解在图像处理中有着重要应用。假定一幅图像有 $n \times n$ 个像素，如果将这 n^2 个数据一起传送，往往会显得数据量太大。因此，我们希望能够改为传送另外一些比较少的数据，并且在接收端还能够利用这些传送的数据重构原图像。

不妨用 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 表示要传送的原 $n \times n$ 个像素。假定对矩阵 $\boldsymbol{A}$ 进行奇异值分解，便得到 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}}$，其中，奇异值按照从大到小的顺序排列。如果从中选择 k 个大奇异值以及与这些奇异值对应的左和右奇异向量逼近原图像，便可以共使用 $k(2n+1)$ 个数值代替原来的 $n \times n$ 个图像数据。这 $k(2n+1)$ 个被选择的新数据是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的前 k 个奇异值、$n \times n$ 左奇异向量矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的前 k 列和 $n \times n$ 右奇异向量矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的前 k 列的元素。

比率

$$\rho = \frac{n^2}{k(2n+1)} \tag{6.8.23}$$

称为图像的压缩比。显然，被选择的大奇异值的个数 k 应该满足条件 $k(2n+1) < n^2$ 即 $k < \dfrac{n^2}{2n+1}$。因此，我们在传送图像的过程中，就无需传送 $n \times n$ 个原始数据，而只需要传送 $k(2n+1)$ 个有关奇异值和奇异向量的数据即可。在接收端，在接收到奇异值 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_k$ 以及左奇异向量 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_k$ 和右奇异向量 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_k$ 后，即可通过截尾的奇异值分解公式

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{v}_i^{\mathrm{T}} \tag{6.8.24}$$

重构出原图像。

一个容易理解的事实是：若 k 值偏小，即压缩比 ρ 偏大，则重构的图像的质量有可能不能令人满意。反之，过大的 k 值又会导致压缩比过小，降低图像压缩和传送的效率。因此，需要根据不同种类的图像，选择合适的压缩比，以兼顾图像传送效率和重构质量。

6.9 广义奇异值分解的应用

仍然考虑式 (6.8.11) 的系统的辨识。但是，不同的是，这里的输入/输出被有色噪声所污染。假定级联矩阵

$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{H}_1 \\ \boldsymbol{H}_2 \end{bmatrix}$$

的列存在零均值的独立同分布误差，它们之间的误差协方差矩阵为 $\boldsymbol{\Delta}$ (包含一个比例因子)，其中

$$\boldsymbol{\Delta} = \boldsymbol{R}_{\Delta} \boldsymbol{R}_{\Delta}^{\mathrm{H}}$$

是矩阵 $\boldsymbol{\Delta}$ 的 Cholesky 分解，分解因子 $\boldsymbol{R}_{\Delta}$ 是下三角矩阵，常称为矩阵 $\boldsymbol{\Delta}$ 的平方根。

容易验证，变换后的矩阵 $\boldsymbol{R}_{\Delta}^{-1}\boldsymbol{H}$ 的列的误差协方差矩阵等于单位矩阵 (包含一比例因子)。因此，系统辨识的方法之一就是用 $\boldsymbol{R}_{\Delta}^{-1}\boldsymbol{H}$ 的奇异值分解代替 $\boldsymbol{H}$ 的奇异值分解求

出矩阵 $\boldsymbol{A}$, $\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{D}$。然而，若 $\boldsymbol{R}_\Delta$ 奇异或病态，则 $\boldsymbol{R}_\Delta^{-1}$ 将不能够直接计算。回顾广义奇异值分解知，应该用矩阵束 $(\boldsymbol{H},\boldsymbol{R}_\Delta)$ 的广义奇异值分解取代 $\boldsymbol{R}_\Delta^{-1}\boldsymbol{H}$ 的普通奇异值分解。于是，很容易将 6.8.2 小节的双重奇异值分解系统辨识方法推广成一种双重广义奇异值分解的系统辨识方法 [424]。

令矩阵束 $(\boldsymbol{H},\boldsymbol{R}_\Delta)$ 的广义奇异值分解为

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{\Sigma}_H$$
$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_\Delta\boldsymbol{V}=\boldsymbol{\Sigma}_{R_\Delta}$$

式中

$$\boldsymbol{\Sigma}_H=\mathrm{diag}(\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_{2li+2mi})$$
$$\boldsymbol{\Sigma}_{R_\Delta}=\mathrm{diag}(\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_{2li+2mi})$$
$$\frac{\alpha_1}{\beta_1}>\frac{\alpha_2}{\beta_2}>\cdots>\frac{\alpha_{2li+2mi}}{\beta_{2li+2mi}}$$

现在的情况与 6.8.2 小节的情况非常类似。在 6.8.2 节，$\boldsymbol{H}_1$ 和 $\boldsymbol{H}_2$ 的行空间的交集是利用级联矩阵 $\boldsymbol{H}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}_1\\ \boldsymbol{H}_2\end{bmatrix}$ 的最小有向信号能量 $\left(\text{即}\begin{bmatrix}U_{12}\\ U_{22}\end{bmatrix}，\text{且}\,\boldsymbol{U}_{12}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_1=-\boldsymbol{U}_{22}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_2\right)$ 计算的。因此，在现在的情况下，可以利用 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_{12}\\ \boldsymbol{X}_{22}\end{bmatrix}$ (其定义在后面给出) 计算 $\boldsymbol{H}_1$ 和 $\boldsymbol{H}_2$ 的行空间的交集。

先考虑无噪声的情况 (误差的协方差与 $\boldsymbol{\Delta}$ 成正比，但比例因子为零)，然后再说明推导的结果对于非零的误差分布仍然成立。

如果数据是无噪声的，则根据上述广义奇异值分解知

$$\boldsymbol{H}_1=\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}_1\\ \boldsymbol{H}_2\end{bmatrix}=\boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_H\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_{11} & \boldsymbol{X}_{12}\\ \boldsymbol{X}_{21} & \boldsymbol{X}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_{11} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{U}^T$$

式中，各个分块矩阵的维数分别为

$$\dim(X_{11})=(mi+li)\times(2mi+n)$$
$$\dim(X_{12})=(mi+li)\times(2li-n)$$
$$\dim(X_{21})=(mi+li)\times(2mi+n)$$
$$\dim(X_{22})=(mi+li)\times(2li-n)$$
$$\dim(\boldsymbol{\Sigma}_{11})=(2mi+n)\times(2mi+n)$$

由

$$\boldsymbol{X}_{12}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_1=-\boldsymbol{X}_{22}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_2$$

可知，$\boldsymbol{X}_{12}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_1$ 的行空间等于欲求的交集。由于 $\boldsymbol{X}_{12}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_1$ 包含 $2li-n$ 个行向量，而其中只有 n 个 (交集的维数) 行向量线性无关，所以我们需要从 $2li-n$ 个行向量中选出 n 个合

适的向量来。利用广义奇异值分解，容易证明：

$$\boldsymbol{X}_{12} = [\boldsymbol{X}_{12}^{(1)},\ \boldsymbol{X}_{12}^{(2)},\ \boldsymbol{X}_{12}^{(3)}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_{(li-n)\times(li-n)} & & \\ & \boldsymbol{C}_{n\times n} & \\ & & \boldsymbol{O}_{(li-n)\times(li-n)} \end{bmatrix} \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$$

$$\boldsymbol{X}_{22} = [\boldsymbol{X}_{22}^{(1)},\ \boldsymbol{X}_{22}^{(2)},\ \boldsymbol{X}_{22}^{(3)}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{O}_{(li-n)\times(li-n)} & & \\ & \boldsymbol{S}_{n\times n} & \\ & & \boldsymbol{I}_{(li-n)\times(li-n)} \end{bmatrix} \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$$

其中，$\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵，并且

$$\boldsymbol{C} = \mathrm{diag}(c_1, c_2, \cdots, c_n)$$

$$\boldsymbol{S} = \mathrm{diag}(s_1, s_2, \cdots, s_n)$$

$$\boldsymbol{I}_{n\times n} = \boldsymbol{C}^2 + \boldsymbol{S}^2$$

显然，只有 $\boldsymbol{X}_{12}^{(2)}$ 提供计算交集的有用向量组合，故可以取

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{X}_{12}^{(2)} \boldsymbol{H}_1$$

现在，系统矩阵可以通过下述简化的矩阵方程 (忽略共同的正交因子 $\boldsymbol{U}$) 计算：

$$\begin{bmatrix} (\boldsymbol{X}_{12}^{(2)})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}(m+l+1:(i+1)(m+l), 1:2mi+n)\boldsymbol{\Sigma}_{11} \\ \boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}(mi+li+m+1:(m+l)(i+1), 1:2mi+n)\boldsymbol{\Sigma}_{11} \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} \boldsymbol{A} & \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{D} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} (\boldsymbol{X}_{12}^{(2)})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}(1:mi+li, 1:2mi+n)\boldsymbol{\Sigma}_{11} \\ \boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}(mi+li+1:mi+li+m, 1:2mi+n)\boldsymbol{\Sigma}_{11} \end{bmatrix}$$

式中，$\boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}(r:s, v:w)$ 代表 $\boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}$ 的子矩阵，它具有 $\boldsymbol{X}^{-\mathrm{T}}$ 的第 $r, r+1, \cdots, s$ 行和第 $v, v+1, \cdots, w$ 列。

如果在 $\boldsymbol{H}_1$ 和 $\boldsymbol{H}_2$ 内的测量数据存在某种不精确度，则所有的广义奇异值都是非零的。此时，需要将最小的广义奇异值置零。应该指出的是，当 $\boldsymbol{H}$ 的列数趋于无穷，且 $\boldsymbol{H}$ 的各列是具有零均值和相同的误差协方差矩阵 $\boldsymbol{\Delta}$ (包含一比例因子) 的独立同分布误差时，广义奇异值分解中的矩阵 $\boldsymbol{X}$ 可以一致计算。由于系统矩阵只根据 $\boldsymbol{X}$ 计算，所以系统模型的估计是一致的。

信号处理中著名的 MUSIC (多重信号分类) 方法等价为广义奇异值分解问题。另一著名的 ESPRIT (借助旋转不变技术估计信号参数) 方法是广义特征值分解的巧妙应用。我们将在第 8 章详细介绍这两种应用。

本章小结

本章对矩阵的奇异值分析展开了专题讨论。首先分析了单个矩阵的 (普通) 奇异值分解 (OSVD)、奇异值的性质以及奇异值分解的数值计算。然后，以两个或者多个矩阵为对象，介绍了各种推广的奇异值分解：

(1) 两个矩阵乘积 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}$ 的奇异值分解，简称乘积奇异值分解 (PSVD);

(2) 两个矩阵组成的矩阵对 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义奇异值分解 (GSVD);

(3) 矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B},\boldsymbol{C})$ 的约束奇异值分解 (RSVD)。

(4) 矩阵相对于某种分块结构的结构奇异值。

普通奇异值分解、乘积奇异值分解和广义奇异值分解都是约束奇异值分解的特例。

本章最后两节分别介绍了奇异值分解在静态系统建模、系统辨识、阶数确定、系统的可控性、图像压缩中的应用，以及广义奇异值分解在系统辨识中的应用。

习 题

6.1 已知矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&1\\1&1\\0&0\end{bmatrix}$$

通过计算 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的特征值和特征向量，求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解。

6.2 计算矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&-1\\3&-3\\-3&3\end{bmatrix}$$

的奇异值分解。

6.3 计算矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}3&4&5\\2&1&7\end{bmatrix}$$

的奇异值分解。

6.4 已知矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-149&-50&-154\\537&180&546\\-27&9&-25\end{bmatrix}$$

求 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值以及与最小奇异值 σ_1 相对应的左、右奇异向量。

6.5 令 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{x}\boldsymbol{p}^{\mathrm{H}}+\boldsymbol{y}\boldsymbol{q}^{\mathrm{H}}$，其中，$\boldsymbol{x}\perp\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{p}\perp\boldsymbol{q}$。求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Frobenius 范数 $\|\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}$。(提示: 计算 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$，并求 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值。)

6.6 已知 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解，矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的奇异值与 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值有何关系?

6.7 证明：若 $\boldsymbol{A}$ 为正方矩阵，则 $|\det(\boldsymbol{A})|$ 等于 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值之积。

6.8 假定 $\boldsymbol{A}$ 为可逆矩阵，求 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的奇异值分解。

6.9 证明：若 $\boldsymbol{A}$ 为 $n\times n$ 正定矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值与 $\boldsymbol{A}$ 的特征值相同。

6.10 令 $\boldsymbol{A}$ 为 $m\times n$ 矩阵，且 $\boldsymbol{P}$ 为 $m\times m$ 正交矩阵。证明 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值相同。矩阵 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 的左、右奇异向量有何关系?

6.11　令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 矩阵，并且 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的特征值，相对应的特征向量为 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$。证明 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值 σ_i 等于范数 $\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i\|$，即

$$\sigma_i=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i\|,\qquad i=1,2,\cdots,n$$

6.12　令 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 和 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的特征值和特征向量。假定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 r 个非零的奇异值，证明 $\{\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_r\}$ 是列空间 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})$ 的一组正交基，并且 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=r$。

6.13　令 $\boldsymbol{B},\boldsymbol{C}\in R^{m\times n}$，求复矩阵 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}+\mathrm{j}\boldsymbol{C}$ 与实分块矩阵 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{B} & -\boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{B}\end{bmatrix}$ 的奇异值和奇异向量之间的关系。

6.14　用矩阵 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n}$ $(m\geqslant n)$ 的奇异向量表示 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{A} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$ 的特征向量。

6.15　利用 MATLAB 函数 [U, S, V] = svd(X) 求解方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$，其中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 3 & 1 & 3\\ 1 & 0 & 1\\ 2 & 2 & 1\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{b}=\begin{bmatrix}1\\ 4\\ 3\\ 2\end{bmatrix}$$

6.16　假定计算机仿真的观测数据为

$$x(n)=\sqrt{20}\sin(2\pi 0.2n)+\sqrt{2}\sin(2\pi 0.215n)+w(n)$$

产生，其中，$w(n)$ 是一高斯白噪声，其均值为 0，方差为 1，并取 $n=1,2,\cdots,128$。试针对 10 次独立的仿真实验数据，分别确定自相关矩阵

$$\boldsymbol{R}=\begin{bmatrix}r(0) & r(-1) & \cdots & r(-2p)\\ r(1) & r(0) & \cdots & r(-2p+1)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ r(M) & r(M-1) & \cdots & r(M-2p)\end{bmatrix}$$

的有效秩。式中，$r(k)=\dfrac{1}{128}\displaystyle\sum_{i=1}^{128-k}x(i)x(i+k)$ 表示观测信号的样本自相关函数（未知的观测数据皆令其等于 0），并取 $M=50$，$p=10$。

6.17 [184]　使用奇异值分解证明：若 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n}$ $(m\geqslant n)$，则存在 $\boldsymbol{Q}\in R^{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{P}\in R^{n\times n}$，使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{P}$，其中，$\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}_n$，并且 $\boldsymbol{P}$ 是对称的和非负定的。这一分解有时称为极分解 (polar decomposition)，因为它与复数分解 $z=|z|\mathrm{e}^{\mathrm{j}\arg(z)}$ 类似。

第 7 章　总体最小二乘方法

线性参数估计问题广泛存在于众多科学与工程学科，如信号处理、自动控制、系统理论、物理、化学工程、统计学、经济学、生物学、医学和军事工程等。最小二乘方法是最常用的线性参数估计方法。实际上，早在高斯的年代，最小二乘方法就用来对平面上的点拟合线，对高维空间的点拟合超平面。然而，若给定一数据向量 $\boldsymbol{b}$ 和一数据矩阵 $\boldsymbol{A}$，通过求解线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘方法，只是在 $\boldsymbol{b}$ 向量的噪声或误差是零均值的高斯白噪声的少数情况下，才能保证误差的平方和为最小，最小二乘估计 $\boldsymbol{x}_{\rm LS}$ 才等价于极大似然法的解。如果 $\boldsymbol{A}$ 也存在误差或者扰动，那么最小二乘估计 $\boldsymbol{x}_{\rm LS}=(\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{b}$ 从统计观点看就不再是最优的，它将是有偏的，而且偏差的协方差将由于 $\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}$ 的噪声误差的作用而增加。因此，当 $\boldsymbol{A}$ 也存在噪声时，应该使用其他的推广最小二乘方法。作为奇异值分解在线性代数中的应用，本章将重点介绍总体最小二乘方法及其推广——约束总体最小二乘和结构总体最小二乘方法。

7.1　最小二乘方法

最小二乘方法是一种在科学计算中广泛使用的方法。本节简要分析最小二乘方法的工作原理、最优解的条件及其不足。

7.1.1　参数的唯一可辨识性

给定 $m\times 1$ 数据向量 $\boldsymbol{b}$ 和 $m\times n$ 数据矩阵 $\boldsymbol{A}$，我们希望求解矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$。如果无噪声存在，则适定方程组 (矩阵 $\boldsymbol{A}$ 正定) 是一致的，方程存在唯一的解 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{b}$。然而，矩阵方程超定 (独立的方程个数大于独立的未知数个数) 时，$\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 将不再是一致方程。此时，我们会很自然地想到选择这样一种求解的准则：使误差的平方和

$$\phi=\|\Delta\boldsymbol{b}\|^2=(\Delta\boldsymbol{b})^{\rm T}\Delta\boldsymbol{b}=(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax})^{\rm T}(\boldsymbol{b}-\boldsymbol{Ax}) \tag{7.1.1}$$

最小。这样得到的解 $\boldsymbol{x}$ 称为最小二乘解。最小二乘方法等价于

$$\text{在条件 } \boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b} \text{ 约束下，}\quad \min_{\boldsymbol{x},\Delta\boldsymbol{b}}\|\Delta\boldsymbol{b}\|$$

因此，最小二乘方法的基本思想就是使校正项 $\Delta\boldsymbol{b}$ 尽可能小，同时通过强令 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}$ 补偿存在于数据向量 $\boldsymbol{b}$ 中的噪声。为了得到最小二乘解，展开式 (7.1.1) 得到

$$\phi=\boldsymbol{b}^{\rm T}\boldsymbol{b}-\boldsymbol{b}^{\rm T}\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{x}^{\rm T}\boldsymbol{A}^{\rm T}\boldsymbol{b}+\boldsymbol{x}^{\rm T}\boldsymbol{A}^{\rm T}\boldsymbol{Ax}$$

求 ϕ 相对于 $\boldsymbol{x}$ 的导数，并令其结果等于零，则有

$$\frac{\mathrm{d}\phi}{\mathrm{d}x} = -2\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} + 2\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = 0$$

也就是说，解 $\boldsymbol{x}$ 必然满足

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \tag{7.1.2}$$

当 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有不同的秩时，上述方程的解有两种不同的情况。

情况 1　$\text{rank}(\boldsymbol{A}) = n$

由于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 非奇异，所以方程有唯一的解：

$$x = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} \tag{7.1.3}$$

这恰好就是我们在第 1 章证明过的最小二乘解。在参数估计理论中，称这种可以唯一确定的未知参数 $\boldsymbol{x}$ 是 (唯一) 可辨识的。

情况 2　$\text{rank}(\boldsymbol{A}) < n$

在这种情况下，由 $\boldsymbol{x}$ 的不同解均得到相同的 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 值。显而易见，虽然数据向量 $\boldsymbol{b}$ 可以提供有关 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的某些信息，但是却无法区别对应于相同 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 值的各个不同的未知参数向量 $\boldsymbol{x}$。因此，称这样的参数向量是不可辨识的。更一般地，如果某参数的不同值给出在抽样空间上的相同分布，则称该参数是不可辨识的 [419]。

下面以信号处理中的三个典型例子说明可辨识性的重要性，其中，例 7.1.1 的可辨识性比较简单，例 7.1.2 是一个缺乏可辨识性的典型例子，而例 7.1.3 则介于二者之间。

例 7.1.1 (MYW 方程)　考虑一个平稳的离散 ARMA (p,q) 过程

$$\sum_{i=0}^{p} a_i x(n-i) = \sum_{j=0}^{q} b_j e(n-j) \tag{7.1.4}$$

其中，输入是一个正态分布的白噪声，即 $e(n) \sim N(0,\sigma^2)$。对于此模型，有下列著名的修正 Yule-Walker (MYW) 方程：

$$\sum_{i=0}^{p} a_i R_x(\tau - i) = 0, \qquad \forall \tau > q \tag{7.1.5}$$

假定已知足够多的自相关函数 $R_x(\tau) = \mathrm{E}\{x(n)x(n+\tau)\}$，问题是，MYW 方程有无穷多个，我们能否从有限个方程唯一地确定 AR 参数 $a_i, i = 1,2,\cdots,p$?

可以证明 [459, pp.89~90]，若多项式 $A(z) = \sum_{i=0}^{p} a_i z^{-i}$ 和 $B(z) = \sum_{i=0}^{q} b_i z^{-i}$ 没有可对消的因子，即 $a_p \neq 0$，则 AR 参数 a_i 可由

$$\sum_{i=0}^{p} a_i R_x(\tau - i) = 0, \qquad \tau = q+1, q+2, \cdots, q+p \tag{7.1.6}$$

唯一地确定或辨识。在 AR 参数的可辨识性的证明中，主要是证明式 (7.1.6) 的矩阵形式 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{a} = -\boldsymbol{r}$ 的自相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 是满秩的。

例 7.1.2 (二维 MYW 方程) 考查平稳的二维线性 ARMA $(p_1, p_2; q_1, q_2)$ 过程

$$\sum_{i=0}^{p_1}\sum_{j=0}^{p_2} a_{ij}x(m-i, n-j) = \sum_{i=0}^{q_1}\sum_{j=0}^{q_2} b_{ij}e(m-i, n-j) \tag{7.1.7}$$

其中，$e(m,n)$ 是零均值、方差为 σ_e^2 的二维白噪声。对此模型，有二维 MYW 方程

$$\sum_{i=0}^{p_1}\sum_{j=0}^{p_2} a_{ij}R_x(r-i, s-j) = \sigma_e^2\delta(r,s), \qquad (r,s)\in B \tag{7.1.8}$$

式中

$$B = \{(r,s)|r > q_1 \text{ 与 (或) } s > q_2\}$$

二维 AR 参数 a_{ij} 不是唯一可辨识的，因为给定若干二维自相关函数 $R_x(r,s)$，虽然可以从二维 MYW 方程 (7.1.8) 确定一组二维 AR 参数 a_{ij}，但是却不能够保证它们是原来的二维 AR 参数。这主要是因为，求解二维 MYW 方程 (7.1.8) 所需要的二维自相关函数 $R_x(r,s)$ 的独立个数 (自相关函数是偶函数) 要比 a_{ij} 的个数多，不能够满足所谓的二维自相关函数匹配原则，详见文献 [520] 中的 8.4 节。

例 7.1.3 (高阶累积量 MYW 方程) 如果激励 ARMA 模型式 (7.1.4) 的输入 $e(n)$ 是一个零均值的非高斯白噪声，则非高斯输出过程 $\{x(n)\}$ 的高阶累积量 $c_{kx}(\tau_1,\cdots,\tau_{k-1})$ 服从下面的 MYW 方程：

$$\sum_{i=0}^{p} a_i c_{kx}(\tau - i, m) = 0, \qquad \tau > q,\ m \text{ 任意} \tag{7.1.9}$$

其中，$c_{kx}(\tau,m) = c_{kx}(\tau,m,0,\cdots,0)$。对于某个固定的 m，如果 MYW 方程存在唯一的解，就称 $c_{kx}(\tau,m)$ 是一个满秩切片。然而，对于某些 m，满秩切片有可能不存在。例如，对于最大相位的 ARMA(2,2) 模型，有

$$H(z) = \frac{(z-\alpha_1^{-2})(z-\alpha_1^{-1}\alpha_2^{-1})}{(z-\alpha_1)(z-\alpha_2)}$$

其中，$\alpha_1 \neq \alpha_2$。Swami 和 Mendel [438] 证明了，对任意 $m \neq 0$，以下递推关系均成立：

$$c_{3x}(-\tau,m) - \alpha_2 c_{3x}(1-\tau,m) = 0, \qquad \tau > 1$$

这意味着，只要未包括 $m=0$ 在内，无论使用多少一维切片 $c_{3x}(\tau,m)(m\neq 0)$ 都只能辨识极点 α_2，而不可能辨识极点 α_1。究竟需要多少切片以及哪些切片才能确保恢复出全部极点或真实的 AR 参数？这就是利用高阶累积量估计非高斯 ARMA 模型 AR 参数的 (唯一) 可辨识性问题。可以证明 [438],[172]，当取 $\tau = q+1, q+2, \cdots, q+p$ 且 $m = q-p, q-p+1, \cdots, q$ 时，高阶累积量 MYW 方程式 (7.1.9) 的解是唯一确定的，即给出原 AR 参数。

7.1.2 Gauss-Markov 定理

在参数估计理论中，称参数向量 $\boldsymbol{\theta}$ 的估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 为无偏估计，若它的数学期望值等于真实的未知参数向量，即 $\mathrm{E}\{\hat{\boldsymbol{\theta}}\} = \boldsymbol{\theta}$。进一步地，如果一个无偏估计还具有最小方差，则称

这一无偏估计为最优无偏估计。类似地，对于数据向量 $\boldsymbol{b}$ 含有加性噪声或者扰动的超定方程 $\boldsymbol{A\theta}=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e}$，若最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\rm LS}$ 的数学期望等于真实参数向量 $\boldsymbol{\theta}$，便称最小二乘解是无偏的。如果它还具有最小方差，则称最小二乘解是最优无偏的。

定理 7.1.1 (Gauss-Markov 定理) 考虑线性方程组

$$\boldsymbol{A\theta}=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e} \tag{7.1.10}$$

式中，$m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{\theta}$ 分别为常数矩阵和常数向量；$\boldsymbol{b}$ 为 $m\times 1$ 向量，它存在随机误差向量 $\boldsymbol{e}=[e_1,e_2,\cdots,e_m]^{\rm T}$。误差向量的均值向量和协方差矩阵分别为

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}\}=\boldsymbol{0},\qquad \mathrm{cov}(\boldsymbol{e})=\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^{\rm H}\}=\sigma^2\boldsymbol{I}$$

$n\times 1$ 参数向量 $\boldsymbol{\theta}$ 的最优无偏解 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 存在，当且仅当 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=n$。此时，最优无偏解由

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}=(\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{b} \tag{7.1.11}$$

给出，其方差

$$\mathrm{var}(\hat{\boldsymbol{\theta}})\leqslant \mathrm{var}(\tilde{\boldsymbol{\theta}}) \tag{7.1.12}$$

式中，$\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ 是矩阵方程 $\boldsymbol{A\theta}=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e}$ 的任何一个其他解。

证明 由假设条件 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}\}=\boldsymbol{0}$ 立即有

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{b}\}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{A\theta}\}-\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}\}=\boldsymbol{A\theta} \tag{1}$$

利用已知条件 $\mathrm{cov}(\boldsymbol{e})=\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^{\rm H}\}=\sigma^2\boldsymbol{I}$，并注意到 $\boldsymbol{A\theta}$ 与误差向量 $\boldsymbol{e}$ 统计不相关，又有

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^{\rm H}\}=\mathrm{E}\{(\boldsymbol{A\theta}-\boldsymbol{e})(\boldsymbol{A\theta}-\boldsymbol{e})^{\rm H}\}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{A\theta}\boldsymbol{\theta}^{\rm H}\boldsymbol{A}^{\rm H}\}+\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}\boldsymbol{e}^{\rm H}\}=\boldsymbol{A\theta}\boldsymbol{\theta}^{\rm H}\boldsymbol{A}^{\rm H}+\sigma^2\boldsymbol{I} \tag{2}$$

由于 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=n$，矩阵乘积 $\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}$ 非奇异，因此有

$$\mathrm{E}\{\hat{\boldsymbol{\theta}}\}=\mathrm{E}\{(\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{b}\}=(\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\rm H}\mathrm{E}\{\boldsymbol{b}\}=(\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A\theta}=\boldsymbol{\theta}$$

即最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{\theta}}=(\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{b}$ 是矩阵方程 $\boldsymbol{A\theta}=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e}$ 的无偏解。

下面证明 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 具有最小方差。为此，假定 $\boldsymbol{\theta}$ 还有另外一个候补解 $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$，则可以将它写作

$$\tilde{\boldsymbol{\theta}}=\hat{\boldsymbol{\theta}}+\boldsymbol{C}\boldsymbol{b}+\boldsymbol{d}$$

式中，$\boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{d}$ 分别为常数矩阵和常数向量。解 $\tilde{\boldsymbol{\theta}}$ 是无偏的，即

$$\mathrm{E}\{\tilde{\boldsymbol{\theta}}\}=\mathrm{E}\{\hat{\boldsymbol{\theta}}\}+\mathrm{E}\{\boldsymbol{C}\boldsymbol{b}\}+\boldsymbol{d}=\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{CA\theta}+\boldsymbol{d}=\boldsymbol{\theta}+\boldsymbol{CA\theta}+\boldsymbol{d},\quad \forall\,\boldsymbol{\theta}$$

当且仅当

$$\boldsymbol{CA}=\boldsymbol{O}\ (\text{零矩阵}),\qquad \boldsymbol{d}=\boldsymbol{0} \tag{3}$$

利用这两个无偏约束条件，易知 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{Cb}\}=\boldsymbol{C}\mathrm{E}\{\boldsymbol{b}\}=\boldsymbol{CA\theta}=\boldsymbol{0}$。于是，得

$$\begin{aligned}\mathrm{cov}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})&=\mathrm{cov}(\hat{\boldsymbol{\theta}}+\boldsymbol{Cb})=\mathrm{E}\{[(\hat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})+\boldsymbol{Cb}][(\hat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})+\boldsymbol{Cb}]^{\mathrm{H}}\}\\&=\mathrm{cov}(\hat{\boldsymbol{\theta}})+\mathrm{E}\{(\hat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})(\boldsymbol{Cb})^{\mathrm{H}}\}+\mathrm{E}\{\boldsymbol{Cb}(\hat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})^{\mathrm{H}}\}+\mathrm{E}\{\boldsymbol{Cbb}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\}\end{aligned}\tag{4}$$

但是，由式 (1) ~ 式 (3)，易知

$$\begin{aligned}\mathrm{E}\{(\hat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})(\boldsymbol{Cb})^{\mathrm{H}}\}&=\mathrm{E}\{(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{bb}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\}-\mathrm{E}\{\boldsymbol{\theta b}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\}\\&=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\mathrm{E}\{\boldsymbol{bb}^{\mathrm{H}}\}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}-\boldsymbol{\theta}\mathrm{E}\{\boldsymbol{b}^{\mathrm{H}}\}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\\&=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A\theta\theta}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}+\sigma^2\boldsymbol{I})\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}-\boldsymbol{\theta\theta}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{O}\\\mathrm{E}\{\boldsymbol{Cb}(\hat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})^{\mathrm{H}}\}&=[\mathrm{E}\{(\hat{\boldsymbol{\theta}}-\boldsymbol{\theta})(\boldsymbol{Cb})^{\mathrm{H}}\}]^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{O}\\\mathrm{E}\{\boldsymbol{Cbb}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\}&=\boldsymbol{C}\mathrm{E}\{\boldsymbol{bb}^{\mathrm{H}}\}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{C}(\boldsymbol{A\theta\theta}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}+\sigma^2\boldsymbol{I})\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}=\sigma^2\boldsymbol{CC}^{\mathrm{H}}\end{aligned}$$

故式 (4) 可化简为

$$\mathrm{cov}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})=\mathrm{cov}(\hat{\boldsymbol{\theta}})+\sigma^2\boldsymbol{CC}^{\mathrm{H}}\tag{5}$$

利用迹函数的性质 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})+\mathrm{tr}(\boldsymbol{B})$，并注意到对于具有零均值向量的随机向量 $\boldsymbol{x}$，有 $\mathrm{tr}[\mathrm{cov}(\boldsymbol{x})]=\mathrm{var}(\boldsymbol{x})$，可将式 (5) 改写作

$$\mathrm{var}(\tilde{\boldsymbol{\theta}})=\mathrm{var}(\hat{\boldsymbol{\theta}})+\sigma^2\mathrm{tr}(\boldsymbol{CC}^{\mathrm{H}})\geqslant\mathrm{var}(\hat{\boldsymbol{\theta}})$$

式中，利用了迹函数的不等式 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{CC}^{\mathrm{H}})\geqslant 0$。这就证明了 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$ 具有最小方差，从而是最优无偏解。 ■

注意，定理 7.1.1 的条件 $\mathrm{cov}(\boldsymbol{e})=\sigma^2\boldsymbol{I}$ 意味着加性误差向量 $\boldsymbol{e}$ 的各个分量互不相关、并且具有相同方差 σ^2。只有在这种情况下，最小二乘解才是无偏的和最优的。这正是 Gauss-Markov 定理的物理含意所在。

假定数据矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}$，数据向量 $\boldsymbol{b}\in C^m$ 可以表示为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}_0+\Delta\boldsymbol{A},\qquad \boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}_0+\Delta\boldsymbol{b}\tag{7.1.13}$$

其中，$\Delta\boldsymbol{A}$ 和 $\Delta\boldsymbol{b}$ 分别是满秩的一致线性方程组 $\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{b}_0$ 的噪声扰动。

若数据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的扰动矩阵 $\Delta\boldsymbol{A}$ 不是零矩阵，则 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 一般是有偏的，不再与最小均方误差估计或极大似然法等价。

假定 $(\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0)^{-1}(\Delta\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0+\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\Delta\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\Delta\boldsymbol{A})$ 的特征值小于 1。此时，可以对 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}$ 进行展开，并得到 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 的下列近似表达式 (最高至 $\Delta\boldsymbol{A}$ 的一阶项) [222]：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}\approx&(\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0)^{-1}\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{b}_0+(\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0)^{-1}\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\Delta\boldsymbol{b}+\\&(\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0)^{-1}\Delta\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}_0(\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0)^{-1}\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}]\boldsymbol{b}_0\\=&(\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0)^{-1}\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\Delta\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0)^{-1}\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}_0\end{aligned}\tag{7.1.14}$$

从该表达式可以看出，如果 $\boldsymbol{A}$ 的分量是零均值、方差为 σ_1^2 的独立同分布噪声，$\Delta\boldsymbol{b}$ 的分量是零均值、方差为 σ_2^2 的独立同分布噪声，而且 $\Delta\boldsymbol{A}$ 和 $\Delta\boldsymbol{b}$ 的分量相互独立，则最小二

乘解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{LS}}$ 的方差与 $\Delta\boldsymbol{A}=\boldsymbol{O}$ (零矩阵) 的情况相比有明显增加。业已证明 [222]，方差的增加倍数等于

$$1+(\sigma_1/\sigma_2)^2\|(\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0)^{-1}\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}_0\|^2$$

总结以上讨论知，普通最小二乘的基本思想是用一个范数平方为最小的扰动向量 $\boldsymbol{e}$ 去干扰数据向量 $\boldsymbol{b}$，以校正 $\boldsymbol{b}$ 中存在的噪声。当 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 二者均存在扰动时，求解矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘方法将会导致大的方差。

7.2 总体最小二乘：理论与方法

为了克服最小二乘方法的缺点，在求解矩阵方程的时候，就需要同时考虑矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和向量 $\boldsymbol{b}$ 中的扰动。总体最小二乘方法体现的正是这一基本思想。

7.2.1 总体最小二乘解

尽管最初的称呼不同，总体最小二乘 (total least squares, TLS) 实际上已有相当长的历史了。有关总体最小二乘最早的思想可追溯到 Pearson 于 1901 年发表的论文 [359]，当时他考虑的是 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 同时存在误差时矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的近似求解方法。但是，只是在 1980 年，才由 Golub 和 Van Loan [182] 从数值分析的观点首次对这种方法进行了整体分析，并正式称之为总体最小二乘。在数理统计中，这种方法称为正交回归 (orthogonal regression) 或变量误差回归 (errors-in-variables regression) [176]。在系统辨识中，总体最小二乘称为特征向量法或 Koopmans-Levin 方法 [458]。现在，总体最小二乘方法已经广泛应用于工程领域中。

总体最小二乘的基本思想可以归纳为：不仅用扰动向量 $\boldsymbol{e}$ 去干扰数据向量 $\boldsymbol{b}$，而且用扰动矩阵 $\boldsymbol{E}$ 同时干扰数据矩阵 $\boldsymbol{A}$，以便校正在 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 二者内存在的扰动。换句话说，在总体最小二乘中，考虑的是矩阵方程

$$(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e} \tag{7.2.1}$$

的求解。显然，上式也可以改写作

$$([-\boldsymbol{b},\ \boldsymbol{A}]+[-\boldsymbol{e},\ \boldsymbol{E}])\begin{bmatrix}1\\ \boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\boldsymbol{0} \tag{7.2.2}$$

或等价为

$$(\boldsymbol{B}+\boldsymbol{D})\boldsymbol{z}=\boldsymbol{0} \tag{7.2.3}$$

式中，增广矩阵 $\boldsymbol{B}=[-\boldsymbol{b},\ \boldsymbol{A}]$ 和扰动矩阵 $\boldsymbol{D}=[-\boldsymbol{e},\ \boldsymbol{E}]$ 均为 $m\times(n+1)$ 维矩阵，而 $\boldsymbol{z}=\begin{bmatrix}1\\ \boldsymbol{x}\end{bmatrix}$ 为 $(n+1)\times 1$ 向量。

求解齐次方程 (7.2.3) 的总体最小二乘方法可以表示为约束最优化问题：

$$\min_{\boldsymbol{D},\boldsymbol{x}}\|\boldsymbol{D}\|_{\mathrm{F}}^2 \tag{7.2.4}$$

约束条件为

$$(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e}) \in \mathrm{Range}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E}) \tag{7.2.5}$$

式中，$\|\boldsymbol{D}\|_{\mathrm{F}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{D}$ 的 Fronenius 范数，即

$$\|\boldsymbol{D}\|_{\mathrm{F}} = \left(\sum_{i=1}^{m}\sum_{j=1}^{n} d_{ij}^2\right)^{1/2} = \mathrm{tr}(\boldsymbol{D}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{D}) \tag{7.2.6}$$

且约束条件 $(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e}) \in \mathrm{Range}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E})$ 的涵义为：若 $(\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e}) \in C^{m\times 1}$，则一定可以找到某个 $\boldsymbol{x} \in C^{n\times 1}$ 使得 $\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e} = (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E})\boldsymbol{x}$。

当 $m < n+1$ 时，方程 (7.2.4) 是欠定的，存在无穷多个解 $\boldsymbol{x}$，而 TLS 方法可给出最小范数解。下面重点研究超定方程 (即 $m > n$) 的总体最小二乘解。

在超定方程的总体最小二乘解中，有两种可能的情况。

情况 1　σ_n 明显比 σ_{n+1} 大，即最小的奇异值只有一个。

式 (7.2.4) 表明，总体最小二乘问题可以归结为：求一具有最小范数平方的扰动矩阵 $\boldsymbol{D} \in C^{m\times(n+1)}$ 使得 $\boldsymbol{B}+\boldsymbol{D}$ 是非满秩的 (如果满秩，则只有平凡解 $\boldsymbol{z}=\boldsymbol{0}$)。

事实上，如果约束最小二乘解 $\boldsymbol{z}$ 是一个单位范数的向量，并且将式 (7.2.3) 改写为 $\boldsymbol{Bz} = \boldsymbol{r} = -\boldsymbol{Dz}$，则总体最小二乘问题式 (7.2.4) 又可以等价写作一个带约束的标准最小二乘问题

$$\min \|\boldsymbol{Bz}\|_2^2 = \min \|\boldsymbol{r}\|_2^2 \tag{7.2.7}$$

约束条件为

$$\boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{z} = 1 \tag{7.2.8}$$

因为 $\boldsymbol{r}$ 可以视为矩阵方程 $\boldsymbol{Bz}=\boldsymbol{0}$ 的总体最小二乘解 $\boldsymbol{z}$ 的误差向量。换言之，总体最小二乘解 $\boldsymbol{z}$ 是使得误差平方和 $\|\boldsymbol{r}\|_2^2$ 为最小的最小二乘解。

上述带约束的最小二乘问题很容易用 Lagrange 乘数法求解。定义目标函数为

$$J = \|\boldsymbol{Bz}\|_2^2 + \lambda(1-\boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{z}) \tag{7.2.9}$$

式中，λ 为 Lagrange 乘数。注意到 $\|\boldsymbol{Bz}\|_2^2 = \boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Bz}$，故由 $\dfrac{\partial J}{\partial \boldsymbol{z}^*}=0$，得到

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Bz} = \lambda\boldsymbol{z} \tag{7.2.10}$$

这表明，Lagrange 乘数应该选择为矩阵 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}$ 的最小特征值 (即 $\boldsymbol{B}$ 的最小奇异值的平方根)，而总体最小二乘解 $\boldsymbol{z}$ 是与最小奇异值 $\sqrt{\lambda}$ 对应的右奇异向量。

令 $m\times(n+1)$ 增广矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{U\Sigma V}^{\mathrm{H}} \tag{7.2.11}$$

并且其奇异值按照顺序 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_{n+1}$ 排列，与这些奇异值对应的右奇异向量为 $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_{n+1}$。于是，根据上面的分析，总体最小二乘解为 $\boldsymbol{z}=\boldsymbol{v}_{n+1}$。也就是说，原矩

阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的最小二乘解由下式给出:

$$\boldsymbol{x}_{\text{TLS}}=\frac{1}{v(1,n+1)}\begin{bmatrix}v(2,n+1)\\ \vdots\\ v(n+1,n+1)\end{bmatrix} \tag{7.2.12}$$

其中，$v(i,n+1)$ 是 $\boldsymbol{V}$ 的第 $n+1$ 列的第 i 个元素。

情况 2　最小奇异值多重 (最后面若干个奇异值是重复的或非常接近)。

不妨令

$$\sigma_1\geqslant\sigma_2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_p>\sigma_{p+1}\approx\cdots\approx\sigma_{n+1} \tag{7.2.13}$$

且 $\boldsymbol{v}_i$ 是子空间

$$S=\text{Span}\{\boldsymbol{v}_{p+1},\boldsymbol{v}_{p+2},\cdots,\boldsymbol{v}_{n+1}\}$$

中的任一列向量，则上述任一右奇异向量 $\boldsymbol{v}_i$ 都给出一组总体最小二乘解

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}_i/\alpha_i,\qquad i=p+1,p+2,\cdots,n+1$$

其中，α_i 是向量 $\boldsymbol{v}_i$ 的第一个元素，而其他的元素组成向量 $\boldsymbol{y}_i$，也即 $\boldsymbol{v}_i=\begin{bmatrix}\alpha_i\\ \boldsymbol{y}_i\end{bmatrix}$。因此，会有 $n+1-p$ 个总体最小二乘解。然而，可以找出在某种意义下唯一的总体最小二乘解。可能的唯一解有两种:

(1) 最小范数解: 解向量由 n 个参数组成。

(2) 最优最小二乘近似解: 解向量仅包含 p 个参数。

1. 最小范数解

包含 n 个参数的总体最小二乘解称为最小范数解。求解最小范数解的总体最小二乘算法由 Golub 和 Van Loan[182] 提出。

算法 7.2.1 (最小范数解的 TLS 算法)

步骤 1　计算增广矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的 SVD:

$$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}\begin{bmatrix}\sigma_1 & & & 0\\ & \sigma_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \sigma_{n+1}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\text{H}}$$

并存储矩阵 $\boldsymbol{V}$。

步骤 2　决定主奇异值的个数 p，即利用 $\sigma_p>\sigma_{n+1}+\epsilon\geqslant\sigma_{p+1}\geqslant\cdots\geqslant\sigma_{n+1}$ 确定 p，其中，ϵ 是某个很小的正数。

步骤 3　令 $\boldsymbol{V}_1=[\boldsymbol{v}_{p+1},\boldsymbol{v}_{p+2},\cdots,\boldsymbol{v}_{n+1}]$ 是 $\boldsymbol{V}$ 的列分块形式，并计算 Householder 变换矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 使得

$$\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{Q}=\left[\begin{array}{c|c}\alpha & 0\cdots 0\\ \hline \boldsymbol{y} & \times\end{array}\right]$$

其中，α 是一个标量，× 代表其数值在下一步不起作用的块。

步骤 4 若 $\alpha \neq 0$，则 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{TLS}} = \boldsymbol{y}/\alpha$；若 $\alpha = 0$，则对原设定的 p 无 TLS 解，应减小 p，即使用 $p \leftarrow p-1$，并重复以上步骤，直至求出唯一的 TLS 解。

步骤 4 表明，确定 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{TLS}}$ 只需要使用 $[\alpha, \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}$，因此在步骤 3，没有必要计算整个矩阵 $\boldsymbol{Q}$，只需要计算出 $\boldsymbol{Q}$ 的第 1 列即可。具体说来，$[\alpha, \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}$ 可以通过使 $\boldsymbol{Q}$ 的第 1 列取 $\boldsymbol{V}_1$ 的第 1 行的复数共轭直接获得 (还有其他方法，但这是最简单的一种)。如果令向量 $\bar{\boldsymbol{v}}_1$ 是矩阵 $\boldsymbol{V}_1$ 的第 1 行，即对 $\boldsymbol{V}_1$ 作如下分块：

$$\boldsymbol{V}_1 = \begin{bmatrix} \bar{\boldsymbol{v}}_1 \\ \bar{\boldsymbol{V}} \end{bmatrix} \tag{7.2.14}$$

即可将 TLS 解最终写作

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{TLS}} = \frac{\bar{\boldsymbol{V}}\bar{\boldsymbol{v}}_1^{\mathrm{H}}}{\bar{\boldsymbol{v}}_1\bar{\boldsymbol{v}}_1^{\mathrm{H}}} = \alpha^{-1}\bar{\boldsymbol{V}}\bar{\boldsymbol{v}}_1^{\mathrm{H}} \tag{7.2.15}$$

显然，$\alpha \approx 0$ 对应于 $\boldsymbol{V}_1$ 的第 1 行均为数值很小的元素。在这种情况下，应该减小 p 即增加 $\boldsymbol{V}_1$ 的维数，以便得到一个非零的 $\alpha = \bar{\boldsymbol{v}}_1\bar{\boldsymbol{v}}_1^{\mathrm{H}}$ (注意，这里的 $\bar{\boldsymbol{v}}_1$ 是一个行向量)。

应当注意的是，最小范数解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{TLS}}$ 和原方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的未知参数向量 $\boldsymbol{x}$ 一样，含有 n 个参数。由此可见，尽管 $\boldsymbol{B}$ 的有效秩 p 小于 n，但是最小范数解仍然假定在向量 $\boldsymbol{x}$ 中的 n 个未知参数是相互独立的。事实上，由于增广矩阵 $\boldsymbol{B} = [-\boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}]$ 与原数据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的秩，故 $\boldsymbol{A}$ 的秩也是 p。这意味着，$\boldsymbol{A}$ 中仅有 p 列是线性独立的，从而原方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 中线性独立的待求参数的个数是 p 而不是 n。概而言之，在 TLS 问题的最小范数解中包含了一些冗余的参数，它们与另外一些参数是线性相关的。在信号处理和系统理论中，往往对另外一种不含冗余参数的唯一 TLS 解更加感兴趣，这就是最优最小二乘近似解。

2. 最优最小二乘近似解

首先，令 $m \times (n+1)$ 矩阵 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 是增广矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的一个秩 p 的最佳逼近，即

$$\hat{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}_p\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{7.2.16}$$

式中，$\boldsymbol{\Sigma}_p = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_p, 0, \cdots, 0)$。

再令 $m \times (p+1)$ 矩阵 $\hat{\boldsymbol{B}}_j^{(p)}$ 是 $m \times (n+1)$ 最优逼近矩阵 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 中的一个子矩阵，定义为

$$\hat{\boldsymbol{B}}_j^{(p)}\text{：由 } \hat{\boldsymbol{B}} \text{ 的第 } j \text{ 列到第 } p+j \text{ 列组成的子矩阵} \tag{7.2.17}$$

显然，这样的子矩阵共有 $n+1-p$ 个，即 $\hat{\boldsymbol{B}}_1^{(p)}, \hat{\boldsymbol{B}}_2^{(p)}, \cdots, \hat{\boldsymbol{B}}_{n+1-p}^{(p)}$。

如前所述，$\boldsymbol{B}$ 的有效秩为 p 意味着参数向量 $\boldsymbol{x}$ 中只有 p 个是线性独立的。不妨令 $(p+1) \times 1$ 向量 $\boldsymbol{a} = \begin{bmatrix} 1 \\ \boldsymbol{x}^{(p)} \end{bmatrix}$，其中，$\boldsymbol{x}^{(p)}$ 是由向量 $\boldsymbol{x}$ 中的 p 个线性独立的未知参数组成的列向量。这样一来，原总体最小二乘问题的求解就变成了下列 $n+1-p$ 个 TLS 问题的求解：

$$\hat{\boldsymbol{B}}_j^{(p)}\boldsymbol{a} = 0, \qquad j = 1, 2, \cdots, n+1-p \tag{7.2.18}$$

或等价为合成的 TLS 问题的求解：

$$\begin{bmatrix} \hat{\boldsymbol{B}}(1:p+1) \\ \hat{\boldsymbol{B}}(2:p+2) \\ \vdots \\ \hat{\boldsymbol{B}}(n+1-p:n+1) \end{bmatrix} \boldsymbol{a} = \boldsymbol{0} \tag{7.2.19}$$

式中，$\hat{\boldsymbol{B}}(i:p+i)$ 代表式 (7.2.17) 定义的 $\hat{\boldsymbol{B}}_i^{(p)}$。不难证明

$$\hat{\boldsymbol{B}}(i:p+i) = \sum_{k=1}^{p} \sigma_k \boldsymbol{u}_k (\boldsymbol{v}_k^i)^{\mathrm{H}} \tag{7.2.20}$$

式中，$\boldsymbol{v}_k^i$ 是酉矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的第 k 列向量的一个加窗段，其定义为

$$\boldsymbol{v}_k^i = [v(i,k), v(i+1,k), \cdots, v(i+p,k)]^{\mathrm{T}} \tag{7.2.21}$$

这里，$v(i,k)$ 是酉矩阵 $\boldsymbol{V}$ 第 i 行第 k 列上的元素。

根据最小二乘原理，求方程组 (7.2.19) 的最小二乘解等价于使测度 (或代价) 函数

$$\begin{aligned} f(\boldsymbol{a}) &= [\hat{\boldsymbol{B}}(1:p+1)\boldsymbol{a}]^{\mathrm{H}} \hat{\boldsymbol{B}}(1:p+1)\boldsymbol{a} + [\hat{\boldsymbol{B}}(2:p+2)\boldsymbol{a}]^{\mathrm{H}} \hat{\boldsymbol{B}}(2:p+2)\boldsymbol{a} + \cdots + \\ &\quad [\hat{\boldsymbol{B}}(n+1-p:n+1)\boldsymbol{a}]^{\mathrm{H}} \hat{\boldsymbol{B}}(n+1-p:n+1)\boldsymbol{a} \\ &= \boldsymbol{a}^{\mathrm{H}} \left[\sum_{i=1}^{n+1-p} [\hat{\boldsymbol{B}}(i:p+i)]^{\mathrm{H}} \hat{\boldsymbol{B}}(i:p+i) \right] \boldsymbol{a} \end{aligned} \tag{7.2.22}$$

极小化。

定义 $(p+1)\times(p+1)$ 矩阵

$$\boldsymbol{S}^{(p)} = \sum_{i=1}^{n+1-p} [\hat{\boldsymbol{B}}(i:p+i)]^{\mathrm{H}} \hat{\boldsymbol{B}}(i:p+i) \tag{7.2.23}$$

则测度函数可简写为

$$f(\boldsymbol{a}) = \boldsymbol{a}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{S}^{(p)} \boldsymbol{a} \tag{7.2.24}$$

$f(\boldsymbol{a})$ 的极小化变量 $\boldsymbol{a}$ 由 $\partial f(\boldsymbol{a})/\partial \boldsymbol{a}^* = 0$ 给出，其结果为

$$\boldsymbol{S}^{(p)} \boldsymbol{a} = \alpha \boldsymbol{e}_1 \tag{7.2.25}$$

式中，$\boldsymbol{e}_1 = [1,0,\cdots,0]^{\mathrm{T}}$，而归一化常数 α 应该使解向量 $\boldsymbol{a}$ 的第一个元素等于 1。由定义式 (7.2.23) 和式 (7.2.20) 可以求得

$$\boldsymbol{S}^{(p)} = \sum_{j=1}^{p} \sum_{i=1}^{n+1-p} \sigma_i^2 \boldsymbol{v}_j^i (\boldsymbol{v}_j^i)^{\mathrm{H}} \tag{7.2.26}$$

方程 (7.2.25) 的求解是简单的，它与未知的归一化常数 α 无关。如果我们令 $\boldsymbol{S}^{-(p)}$ 为矩阵 $\boldsymbol{S}^{(p)}$ 的逆矩阵，则解向量 $\boldsymbol{a}$ 仅取决于逆矩阵 $\boldsymbol{S}^{-(p)}$ 的第 1 列。易知，欲求的 TLS 解 $\boldsymbol{x}^{(p)} = [x_{\mathrm{TLS}}(1), x_{\mathrm{TLS}}(2), \cdots, x_{\mathrm{TLS}}(p)]^{\mathrm{T}}$ 由

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{TLS}}(i) = \boldsymbol{S}^{-(p)}(i+1,1)/\boldsymbol{S}^{-(p)}(1,1), \qquad i = 1,2,\cdots,p \tag{7.2.27}$$

给出。通常称这种解为最优最小二乘近似解。由于这种解的参数个数与有效秩相同，故又称为低阶模型或低秩总体最小二乘解 [70]。

归纳起来，求最优最小二乘近似解的具体算法如下。

算法 7.2.2 (SVD-TLS 算法)

步骤 1　计算增广矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的 SVD，并存储右奇异矩阵 $\boldsymbol{V}$。

步骤 2　确定 $\boldsymbol{B}$ 的有效秩 p。

步骤 3　利用式 (7.2.26) 和式 (7.2.21) 计算 $(p+1)\times(p+1)$ 矩阵 $\boldsymbol{S}^{(p)}$。

步骤 4　求 $\boldsymbol{S}^{(p)}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{S}^{-(p)}$，并由式 (7.2.27) 求最优最小二乘近似解。

上述算法的基本思想是由 Cadzow [70] 提出来的。

7.2.2 总体最小二乘解的性能

总体最小二乘有两个非常有趣的解释。一个是它的几何解释 [182]。令 $\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}$ 是矩阵的第 i 行，b_i 是向量 $\boldsymbol{b}$ 的第 i 个元素，则总体最小二乘解 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{TLS}}$ 是使

$$\min_{\boldsymbol{x}} \sum_{i=1}^{n} \frac{|\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|^2}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+1} \tag{7.2.28}$$

的极小化变量，其中，$|\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}-b_i|/(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}+1)$ 是从点 $\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_i\\ b_i\end{pmatrix}\in C^{n+1}$ 到子空间 P_x 内的最近点的距离，且子空间 P_x 定义为

$$P_x=\left\{\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}\\ b\end{pmatrix}\middle|\, \boldsymbol{a}\in C^{n\times 1}, b\in C, b=\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}\right\} \tag{7.2.29}$$

因此，总体最小二乘解可以用子空间 P_x 表征。换言之，总体最小二乘问题等价于求到 n 个二元组 $\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_i\\ b_i\end{pmatrix}, i=1,2,\cdots,n$ 的最近的子空间 P_x，即解点 $\begin{pmatrix}\boldsymbol{a}_i\\ b_i\end{pmatrix}$ 到 P_x 的距离的平方和为最小。图 7.2.1 画出了一维情况下 LS 解与 TLS 解的比较。

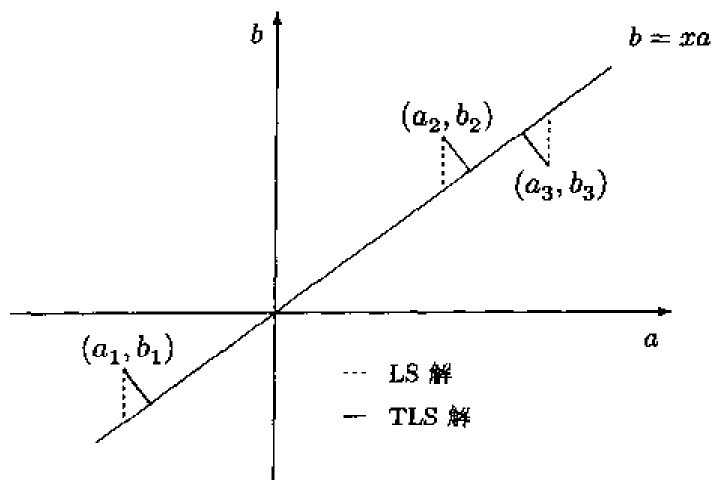


图 7.2.1　LS 解与 TLS 解

图 7.2.1 中，虚线表示的是 LS 解，它是 (与 b 轴) 平行的竖直距离；实线所示为 TLS 解，它始于点 (a_i, b_i)，是到直线 $b = xa$ 的垂直距离。从这一几何解释，可以得出结论：总体最小二乘方法比最小二乘方法好，因为前者在曲线拟合中的残差最小。

另外一个有趣的解释是总体最小二乘解的子空间解释 [380]。总体最小二乘解可以表示为

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \hat{\boldsymbol{x}}_{\rm TLS} \end{bmatrix} = \sum_{i=p+1}^{n+1} \beta_i \boldsymbol{v}_i \tag{7.2.30}$$

其中

$$\beta_i = \frac{-v^*(i, p+1)}{\displaystyle\sum_{j=p+1}^{n+1} |v(j, p+1)|^2} = \frac{-v^*(i, p+1)}{\alpha^2} \tag{7.2.31}$$

因此，解向量 $\begin{bmatrix} 1 \\ \hat{\boldsymbol{x}}_{\rm TLS} \end{bmatrix}$ 是 $\boldsymbol{B} = [-\boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}]$ 的零空间，即

$$\begin{bmatrix} 1 \\ \hat{\boldsymbol{x}}_{\rm TLS} \end{bmatrix} \in {\rm Null}(\boldsymbol{B}) = {\rm Span}\{\boldsymbol{v}_{p+1}, \boldsymbol{v}_{p+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_{n+1}\} \tag{7.2.32}$$

这表明，总体最小二乘解属于由增广矩阵 $\boldsymbol{B}$ 后面 $n+1-p$ 个奇异向量 (特征向量) 张成的噪声子空间。由于 $\boldsymbol{B}$ 由 $[\boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}]$ 给定，所以 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解以一种复杂的方式联系在一起。矩阵 $\boldsymbol{B}^{\rm H}\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A}$ 的特征向量之间没有明显的关系。幸运的是，可以利用下面的表达式

$$\boldsymbol{B}^{\rm H}\boldsymbol{B}\boldsymbol{v}_i = \sigma_i^2 \boldsymbol{v}_i, \qquad i = p+1, p+2, \cdots, n+1$$

假定 $m - n \geqslant n + 1$。

又由 $\boldsymbol{B} = [-\boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}]$ 和 $\boldsymbol{v}_i = \begin{bmatrix} \bar{\boldsymbol{v}}_i \\ v(n+1, i) \end{bmatrix}$ 不难得到

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{b}^{\rm H}\boldsymbol{b} & \boldsymbol{b}^{\rm H}\boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{b} & \boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\boldsymbol{v}}_i \\ v(n+1, i) \end{bmatrix} = \sigma_i^2 \begin{bmatrix} \bar{\boldsymbol{v}}_i \\ v(n+1, i) \end{bmatrix}$$

经过直接运算，由上式得下列关系式：

$$(\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{A} - \sigma_i^2 \boldsymbol{I})\bar{\boldsymbol{v}}_i + v(n+1, i)\boldsymbol{A}^{\rm H}\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0} \tag{7.2.33}$$

$$\boldsymbol{b}^{\rm H}\boldsymbol{A}\bar{\boldsymbol{v}}_i + (\boldsymbol{b}^{\rm H}\boldsymbol{b} - \sigma_i^2)v(n+1, i) = 0 \tag{7.2.34}$$

这里假定 $\boldsymbol{A}$ 是含有噪声或者误差的数据矩阵，因而它是满秩的，即 $\boldsymbol{A}$ 的所有奇异值都大于零。容易证明 [478]，若 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值由

$$\hat{\sigma}_1 \geqslant \hat{\sigma}_2 \geqslant \cdots \geqslant \hat{\sigma}_n$$

给出，并且 $\boldsymbol{B}$ 的奇异值为

$$\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_{n+1}$$

则

$$\sigma_1 \geqslant \hat{\sigma}_1 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_n \geqslant \hat{\sigma}_n \geqslant \sigma_{n+1}$$

若 $\sigma_i \neq \hat{\sigma}_i$，则 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}-\sigma_i^2\boldsymbol{I})$ 是可逆的。如果 $\sigma_i=\hat{\sigma}_1$，则应该取伪逆矩阵 $(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}-\sigma_i^2\boldsymbol{I})^{\dagger}$。考虑到这一点，并综合式 (7.2.33) 和式 (7.2.30)，即可将总体最小二乘解表示成

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{x}}_{\mathrm{TLS}} &= \frac{1}{\alpha^2}\sum_{i=p+1}^{n+1} v^*(n+1,i)\bar{\boldsymbol{v}}_i \\ &= \frac{1}{\alpha^2}\sum_{i=p+1}^{n+1} |v(n+1,i)|^2(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}-\sigma_i^2\boldsymbol{I})^{\dagger}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}\end{aligned} \tag{7.2.35}$$

式中

$$\frac{1}{\alpha^2}\sum_{i=p+1}^{n+1}|v(n+1,i)|^2=1$$

如果 $\sigma_{n+1}+\epsilon>\sigma_{p+1}\geqslant\sigma_{p+2}\geqslant\cdots\geqslant\sigma_{n+1}$，并且 ϵ 很小，则

$$\boldsymbol{x}_{\mathrm{TLS}}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}-\sigma_{n+1}^2\boldsymbol{I})^{\dagger}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b} \tag{7.2.36}$$

因此，总体最小二乘可以解释为一种具有噪声清除的最小二乘方法：先从协方差矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 中减去噪声影响项 $\sigma_{n+1}^2\boldsymbol{I}$，然后再矩阵求逆，得到最小二乘解。如果无噪声数据矩阵 $\boldsymbol{A}_0$ 被扰动后，变为 $\boldsymbol{A}_0+\Delta\boldsymbol{A}$，则协方差矩阵扰动为 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0+\Delta\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0+\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\Delta\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\Delta\boldsymbol{A}$。显然，当扰动 $\Delta\boldsymbol{A}$ 具有零均值时，协方差矩阵的扰动的数学期望 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0\}+\mathrm{E}\{(\Delta\boldsymbol{A})^{\mathrm{H}}\Delta\boldsymbol{A}\}=\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0+\mathrm{E}\{(\Delta\boldsymbol{A})^{\mathrm{H}}\Delta\boldsymbol{A}\}$。若扰动统计不相关，并且具有相同方差，即 $\mathrm{E}\{(\Delta\boldsymbol{A})^{\mathrm{T}}\Delta\boldsymbol{A}\}=\sigma^2\boldsymbol{I}$，则总体最小二乘方法是非常有效的。这是因为，奇异值 σ_{n+1} 恰巧体现扰动因子 σ，使得减去噪声 $\sigma_{n+1}^2\boldsymbol{I}$ 后，可以恢复原来无噪声的数据矩阵的协方差矩阵，即有 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}-\sigma_{n+1}^2\boldsymbol{I}=\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_0$。

更一般地，将 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 中的未知参数向量 $\boldsymbol{x}$ 和数据向量 $\boldsymbol{b}$ 推广为未知参数矩阵 $\boldsymbol{X}$ 和数据矩阵 $\boldsymbol{B}$，即考虑下述矩阵方程

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}\approx\boldsymbol{B},\quad \boldsymbol{A}\in R^{m\times n},\ \boldsymbol{B}\in R^{m\times d},\ \boldsymbol{X}\in R^{n\times d} \tag{7.2.37}$$

的 TLS 解。此时，TLS 解是集合

$$\hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{X}=\hat{\boldsymbol{B}} \tag{7.2.38}$$

的任意解，其中，$\hat{\boldsymbol{A}}$ 和 $\hat{\boldsymbol{B}}$ 根据下面二式确定：

$$\mathrm{Range}(\hat{\boldsymbol{B}})\subset\mathrm{Range}(\hat{\boldsymbol{A}}) \tag{7.2.39}$$

$$\|[\Delta\hat{\boldsymbol{A}},\ \Delta\hat{\boldsymbol{B}}]\|_{\mathrm{F}}=\|[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]-[\hat{\boldsymbol{A}},\ \hat{\boldsymbol{B}}]\|_{\mathrm{F}}\ \text{极小化} \tag{7.2.40}$$

式中，$\|\cdot\|_{\mathrm{F}}$ 表示矩阵的 Frobenius 范数，$\mathrm{Range}(\boldsymbol{M})$ 表示矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的值域。求满足式 (7.2.39) 和式 (7.2.40) 的 $[\Delta\hat{\boldsymbol{A}},\ \Delta\hat{\boldsymbol{B}}]$ 的问题称为 TLS 问题。每当解不唯一时，TLS 便给出最小范数解。为了简便，将 $\boldsymbol{X}$ 的 TLS 解记作 $\hat{\boldsymbol{X}}$。

有意思的是，LS 问题事实上是在式 (7.2.37) ~ 式 (7.2.40) 中固定 $\hat{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{A}$ 的附加条件下的“约束”TLS 问题。

下面从奇异子空间对扰动的敏感度和一致性两个角度分析 TLS 解的性能 [459]。

1. 奇异子空间对扰动的敏感度

式 (7.2.37) 中矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解可用并向量分解形式写作

$$\boldsymbol{A}=\sum_{i=1}^{n}\tilde{\sigma}_i'\tilde{\boldsymbol{u}}_i'(\tilde{\boldsymbol{v}}_i')^{\mathrm{T}},\qquad \tilde{\boldsymbol{u}}_i'\in R^m,\ \tilde{\boldsymbol{v}}_i'\in R^n \tag{7.2.41}$$

式中

$$\tilde{\sigma}_1'\geqslant\tilde{\sigma}_2'\geqslant\cdots\geqslant\tilde{\sigma}_n'\geqslant 0 \tag{7.2.42}$$

类似地，式 (7.2.37) 中增广矩阵 $[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]$ 的奇异值分解也可以表示为

$$[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]=\sum_{i=1}^{n+d}\tilde{\sigma}_i\tilde{\boldsymbol{u}}_i\tilde{\boldsymbol{v}}_i^{\mathrm{T}},\qquad \tilde{\boldsymbol{u}}_i\in R^m,\ \tilde{\boldsymbol{v}}_i\in R^n \tag{7.2.43}$$

式中

$$\tilde{\sigma}_1\geqslant\tilde{\sigma}_2\geqslant\cdots\geqslant\tilde{\sigma}_n\geqslant 0 \tag{7.2.44}$$

任意两个子空间 S_1 和 S_2 之间的距离定义为

$$\mathrm{dist}(S_1,S_2)=\|\boldsymbol{P}_1^{\perp}-\boldsymbol{P}_2^{\perp}\|_{\mathrm{F}} \tag{7.2.45}$$

式中，$\boldsymbol{P}_i^{\perp}$ 是到 S_i 上的正交投影。因此，$\mathrm{dist}(S_1,S_2)$ 描述了子空间 S_1 和 S_2 的接近度。

从投影的角度看问题，最小二乘将数据 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别投影到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异子空间 $\mathrm{Range}([\tilde{\boldsymbol{u}}_1',\tilde{\boldsymbol{u}}_2',\cdots,\tilde{\boldsymbol{u}}_r'])$ 和 $\mathrm{Range}([\tilde{\boldsymbol{v}}_1',\tilde{\boldsymbol{v}}_2',\cdots,\tilde{\boldsymbol{v}}_r'])$，其中，$r=n$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的秩。相比之下，总体最小二乘则将 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别投影到增广矩阵 $[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]$ 的奇异子空间 $\mathrm{Range}([\tilde{\boldsymbol{u}}_1,\tilde{\boldsymbol{u}}_2,\cdots,\tilde{\boldsymbol{u}}_r])$ 和 $\mathrm{Range}([\tilde{\boldsymbol{v}}_1,\tilde{\boldsymbol{u}}_2,\cdots,\tilde{\boldsymbol{v}}_r])$ 上。从它们各自的定义，最小二乘解 $\boldsymbol{X}'$ 是方程组

$$\boldsymbol{A}_r\boldsymbol{X}=\boldsymbol{B}' \tag{7.2.46}$$

的最小范数解，其中

$$\boldsymbol{A}_r=\sum_{i=1}^{r}\tilde{\sigma}_i'\tilde{\boldsymbol{u}}_i'\tilde{\boldsymbol{v}}_i'^{T},\qquad \boldsymbol{B}'=\sum_{i=1}^{r}\tilde{\boldsymbol{u}}_i'\tilde{\boldsymbol{u}}_i'^{T}\boldsymbol{B} \tag{7.2.47}$$

而总体最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{X}}$ 则是方程组

$$\hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{X}=\hat{\boldsymbol{B}} \tag{7.2.48}$$

的最小范数解，其中

$$[\hat{\boldsymbol{A}},\ \hat{\boldsymbol{B}}]=\sum_{i=1}^{r}\tilde{\sigma}_i\tilde{\boldsymbol{u}}_i\tilde{\boldsymbol{v}}_i^{\mathrm{T}}\qquad (\text{TLS 逼近}) \tag{7.2.49}$$

奇异子空间敏感度的不同可以用来解释为什么存在扰动时 TLS 比 LS 具有更好的性能。为此，先考虑无扰动的 TLS 问题 $\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{X}\approx\boldsymbol{B}_0$。令 $m\times(n+d)$ 矩阵 $[\boldsymbol{A}_0,\ \boldsymbol{B}_0]$ 被 $[\Delta\boldsymbol{A}_0,\ \Delta\boldsymbol{B}_0]$ 扰动，结果为 $[\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{B}]=[\boldsymbol{A}_0,\ \boldsymbol{B}_0]+[\Delta\boldsymbol{A}_0,\ \Delta\boldsymbol{B}_0]$。使用 $r(\leqslant n)$ 表示 TLS 逼

近 $[\hat{\boldsymbol{A}}_0, \hat{\boldsymbol{B}}_0]$ 的秩。若对 $[\boldsymbol{A}_0, \boldsymbol{B}_0], [\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}]$ 应用 Wedin 的广义正弦定理 [473] 和 TLS 条件式 (7.2.39) 即 $\text{Range}(\hat{\boldsymbol{A}}) = \text{Range}([\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\boldsymbol{B}}])$，则有

$$\text{dist}(\text{Range}(\hat{\boldsymbol{A}}), \text{Range}(\hat{\boldsymbol{A}}_0)) \leqslant \|[\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{B}]\|_F/(\tilde{\sigma}_r - \sigma_{r+1}) \tag{7.2.50}$$

$$\text{dist}(\text{Range}([\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\boldsymbol{B}}]^T), \text{Range}([\hat{\boldsymbol{A}}_0, \hat{\boldsymbol{B}}_0]^T)) \leqslant \|[\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{B}]\|_F/(\tilde{\sigma}_r - \sigma_{r+1}) \tag{7.2.51}$$

如果 $\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{X} = \boldsymbol{B}_0$ 表示一种精确关系，则有 $[\hat{\boldsymbol{A}}_0, \hat{\boldsymbol{B}}_0] = [\boldsymbol{A}_0, \boldsymbol{B}_0]$，从而式 (7.2.50) 和式 (7.2.51) 中的 $\sigma_{r+1} = 0$。如果考虑满秩问题，即 $\boldsymbol{A}_0$ 有最大秩 $r = n$，则式 (7.2.50) 和式 (7.2.51) 简化为

$$\text{dist}(\text{Range}(\hat{\boldsymbol{A}}), \text{Range}(\hat{\boldsymbol{A}}_0)) \leqslant \|[\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{B}]\|_F/\tilde{\sigma}_n \tag{7.2.52}$$

$$\text{dist}(\text{Range}([\hat{\boldsymbol{A}}, \hat{\boldsymbol{B}}]^T), \text{Range}([\hat{\boldsymbol{A}}_0, \hat{\boldsymbol{B}}_0]^T)) \leqslant \|[\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{B}]\|_F/\tilde{\sigma}_n \tag{7.2.53}$$

这意味着，若扰动 $\|[\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{B}]\|_F$ 保持很小，而且 $[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}]$ 第 r 个和第 $r+1$ 个奇异值之间的“空隙”大的话，则 TLS 解空间接近精确解。

再考虑 LS 问题。令 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_0$ 有秩 r (即 $\sigma'_{r+1} = 0$)，并被 $\Delta\boldsymbol{A}$ 扰动，使得 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_0 + \Delta\boldsymbol{A}$。对 $\boldsymbol{A}_0$ 和 $\boldsymbol{A}$ 应用 Wedin 广义正弦定理，则有

$$\text{dist}(\text{Range}(\boldsymbol{A}), \text{Range}(\boldsymbol{A}_0)) \leqslant \|\Delta\boldsymbol{A}\|_F/\sigma'_r \tag{7.2.54}$$

$$\text{dist}(\text{Range}(\boldsymbol{A}^T), \text{Range}(\boldsymbol{A}_0^T)) \leqslant \|\Delta\boldsymbol{A}\|_F/\sigma'_r \tag{7.2.55}$$

通常，$\boldsymbol{A}$ 有最大秩 $r = n$。此时，式 (7.2.54) 变为

$$\text{dist}(\text{Range}(\boldsymbol{A}), \text{Range}(\boldsymbol{A}_0)) \leqslant \|\Delta\boldsymbol{A}\|_F/\sigma'_n \tag{7.2.56}$$

比较上述 LS 和 TLS 问题的奇异子空间的敏感度，可得到以下重要观察 [459]。

(1) 首先假定数据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是精确关系 $\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{X} = \boldsymbol{B}_0$ 的测量样本。假定 $\|\Delta\boldsymbol{A}\|_F \approx \|[\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{B}]\|_F$ (例如当所有数据都一样被扰动时)，测量误差 $\Delta\boldsymbol{A}$ 和 $\Delta\boldsymbol{B}$ 可以是任意扰动。于是，利用奇异值的交织性质，即 $\tilde{\sigma}_i \geqslant \tilde{\sigma}'_i, i = 1, 2, \cdots, n$ (参见文献 [70])，可以得出结论：与 TLS 问题相关的奇异子空间对噪声的敏感度比与 LS 问题相关的奇异子空间对噪声的敏感度小。这意味着，前者可望“更加接近”它们对应的无扰动子空间。因此，TLS 解可望比 LS 解更加精确。对于 $\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{X} \approx \boldsymbol{B}_0$，情况也如此。

(2) 由于敏感度的不同取决于比率 $(\tilde{\sigma}_r - \sigma_{r+1})/\tilde{\sigma}'_r$，所以当这一比率较大时，TLS 比 LS 具有更高精度这一点将更加明显。这一比率主要受下列因素的影响：长度 (Frobenius 范数)，列的维数和观测矩阵 $\boldsymbol{B}_0$ (或等价为解 $\boldsymbol{X}$) 相对于 $\boldsymbol{A}_0$ 的奇异向量的定向。

2. 一致性

TLS 和 LS 之间的精度差别也与方程个数 m 有关。由于“变量误差”回归估计子与 TLS 解一致，故 Gleser 对变量误差回归估计的一致性分析 [176] 直接适用于 TLS 问题。

定理 7.2.1 (TLS 解的一致性)[176] 假定数据 $[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}] = [\boldsymbol{A}_0 + \Delta\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}_0 + \Delta B]$ 是精确关系 $\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{X} = \boldsymbol{B}_0$ 的测量样本，而且误差矩阵 $[\Delta\boldsymbol{A}, \Delta\boldsymbol{B}]$ 的行是独立同分布的，其均值为零，协方差矩阵为 $s^2\boldsymbol{I}$ (s 是一未知尺度)。若 $\lim\limits_{m\to\infty}\dfrac{1}{m}\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_0$ 存在，且正定的话，则 TLS 解 $\hat{\boldsymbol{X}}_{\mathrm{TLS}}$ 是强一致估计，即

$$\lim_{m\to\infty}\hat{\boldsymbol{X}}_{\mathrm{TLS}} = \boldsymbol{X}, \quad \text{w.p.1}$$

上述定理表明，当 $m\to\infty$ 时，由不可观测的精确关系 $\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{X} = \boldsymbol{B}_0$ 的 m 个观测值求得的 TLS 解 $\hat{\boldsymbol{X}}_{\mathrm{TLS}}^{(m)}$ 以概率 1 (w.p.1) 收敛为真实参数值 $\boldsymbol{X}$。然而，众所周知，在线性回归中，普通 LS 解 $\boldsymbol{X}'$ 在这种情况下总是非一致估计。

7.3 总体最小二乘：应用

举凡需要求解线性方程 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 的工程问题，由于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和向量 $\boldsymbol{b}$ 的元素都是实测数据，总是存在误差。因此，总体最小二乘方法在这些场合都可以使用。事实上，总体最小二乘方法已在工程问题中获得了广泛的应用。本节介绍两个典型应用例子：频率估计及自适应 FIR 滤波的总体最小二乘算法。

7.3.1 总体最小二乘拟合

在科学与工程问题的数值分析中，经常需要对给定的一些数据点，拟合一条曲线或一曲面。由于这些数据点通常是观测得到的，不可避免地会含有误差或被噪声污染，总体最小二乘方法可望给出比一般最小二乘方法更好的拟合结果。

考虑数据拟合问题：给定 n 个数据点 $(x_1,y_1),(x_2,y_2),\cdots,(x_n,y_n)$，希望对这些点拟合一直线。假定直线方程为 $ax+by-c=0$。若直线通过点 (x_0,y_0)，则 $c=ax_0+by_0$。

现在考虑让拟合直线通过已知 n 个数据点的中心

$$\bar{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}x_i, \quad \bar{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}y_i \tag{7.3.1}$$

若将 $c = a\bar{x} + b\bar{y}$ 代入, 则可将直线方程写作

$$a(x-\bar{x}) + b(y-\bar{y}) = 0 \tag{7.3.2}$$

或者用斜率形式等价写为

$$m(x-\bar{x}_0) + (y-\bar{y}) = 0 \tag{7.3.3}$$

参数向量 $[a,b]^{\mathrm{T}}$ 称为拟合直线的法向量 (normal vector)，而 $-m = -a/b$ 称为拟合直线的斜率。于是，直线拟合问题便变成了法向量 $[a,b]^{\mathrm{T}}$ 或者斜率参数 m 的求解。

显然，将 n 个已知数据点代入直线方程后，直线方程不可能严格满足，会存在拟合误差。最小二乘拟合就是使拟合误差的平方和最小化，即最小二乘拟合的代价函数取为

$$D_{\rm LS}^{(1)}(m,\bar{x},\bar{y})=\sum_{i=1}^{n}[(x_i-\bar{x})+m(y_i-\bar{y})]^2 \tag{7.3.4}$$

$$D_{\rm LS}^{(2)}(m,\bar{x},\bar{y})=\sum_{i=1}^{n}[m(x_i-\bar{x})-(y_i-\bar{y})]^2 \tag{7.3.5}$$

令 $\dfrac{\partial D_{\rm LS}^{(i)}(m,\bar{x},\bar{y})}{\partial m}=0$，$i=1,2$，即可求出直线斜率 m。然后，只要将 m 代入式 (7.3.3)，便可得到拟合直线的方程。

与最小二乘拟合不同，总体最小二乘拟合则考虑使各个已知数据点到直线方程 $a(x-x_0)+b(y-y_0)=0$ 的距离平方和最小化。

由高中几何或大学微积分知，点 (p,q) 到直线 $ax+by-c=0$ 的距离 d 由

$$d^2=\frac{(ap+bq-c)^2}{a^2+b^2}=\frac{[a(p-x_0)+b(q-y_0)]^2}{a^2+b^2} \tag{7.3.6}$$

确定。于是，已知的 n 个数据点到直线 $a(x-\bar{x})+b(y-\bar{y})=0$ 的距离平方和为

$$D(a,b,\bar{x},\bar{y})=\sum_{i=1}^{n}\frac{[a(x_i-\bar{x})+b(y_i-\bar{y})]^2}{a^2+b^2} \tag{7.3.7}$$

引理 7.3.1 对过直线的数据点 (x_0,y_0) 和数据点集合 $(x_1,y_1),(x_2,y_2),\cdots,(x_n,y_n)$，恒有不等式

$$D(a,b,\bar{x},\bar{y})\leqslant D(a,b,x_0,y_0) \tag{7.3.8}$$

等号成立，当且仅当 $x_0=\bar{x},y_0=\bar{y}$。

证明[335] 令 $\boldsymbol{w}=[w_1,w_2,\cdots,w_n]^{\rm T}$，$\boldsymbol{z}=[z_1,z_2,\cdots,z_n]^{\rm T}$，且

$$w_i=a(x_i-x_0)+b(y_i-y_0),\quad i=1,2,\cdots,n$$

$$z_i=a(x_i-\bar{x})+b(y_i-\bar{y}),\quad i=1,2,\cdots,n$$

于是，有

$$D(a,b,x_0,y_0)=\|\boldsymbol{w}\|_2^2/(a^2+b^2)$$

$$D(a,b,\bar{x},\bar{y})=\|\boldsymbol{z}\|_2^2/(a^2+b^2)$$

令 $\boldsymbol{1}=[1,1,\cdots,1]^{\rm T}$ 为 $n\times 1$ 求和向量，并定义 $h=a(\bar{x}-x_0)+b(\bar{y}-y_0)$，则 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{z}+h\boldsymbol{1}$。注意到

$$\langle \boldsymbol{z},\boldsymbol{1}\rangle=\sum_{i=1}^{n}z_i=a\left(\sum_{i=1}^{n}x_i-n\bar{x}\right)+b\left(\sum_{i=1}^{n}y_i-n\bar{y}\right)=0a+b0=0$$

即向量 z 与 $\mathbf{1}$ 正交。由正交性 $z \perp \mathbf{1}$，关系式 $w = z + h\mathbf{1}$ 以及 Pythagorean 定理，易知

$$
\begin{aligned}
D(a,b,x_0,y_0) &= \frac{1}{a^2+b^2}\|w\|_2^2 \\
&= \frac{1}{a^2+b^2}\left(\|z\|_2 + h^2\|\mathbf{1}\|_2^2\right) \\
&= D(a,b,\bar{x},\bar{y}) + \frac{h^2 n}{a^2+b^2} \\
&\geqslant D(a,b,\bar{x},\bar{y})
\end{aligned}
$$

等式成立，当且仅当 $h=0$，而 $h=0 \Leftrightarrow x_0=\bar{x}, y_0=\bar{y}$，当 $a \neq 0, b \neq 0$ 时。 ■

引理 7.3.1 表明，总体最小二乘拟合的直线必须通过 n 个数据点的中心 $(\bar{x},\bar{y})$，才能使偏差 D 最小。

为了求拟合直线的法向量 $[a,b]^{\mathrm{T}}$ 或斜率 $-m = -a/b$，下面考虑如何使偏差 D 最小。为此，将 D 写成 2×1 单位向量 $t = (a^2+b^2)^{-1/2}[a,b]^{\mathrm{T}}$ 与 $n\times 2$ 矩阵 M 的乘积，即

$$
D(a,b,\bar{x},\bar{y}) = Mt = \begin{bmatrix} x_1-\bar{x} & y_1-\bar{y} \\ x_2-\bar{x} & y_2-\bar{y} \\ \vdots & \vdots \\ x_n-\bar{x} & y_n-\bar{y} \end{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}} \begin{bmatrix} a \\ b \end{bmatrix} \tag{7.3.9}
$$

式中

$$
M = \begin{bmatrix} x_1-\bar{x} & y_1-\bar{y} \\ x_2-\bar{x} & y_2-\bar{y} \\ \vdots & \vdots \\ x_n-\bar{x} & y_n-\bar{y} \end{bmatrix} \tag{7.3.10}
$$

由式 (7.3.9) 直接可得下面的结果 [335]。

命题 7.3.1 距离平方和 $D(a,b,\bar{x},\bar{y})$ 在单位法向量 $t=(a^2+b^2)^{-1/2}[a,b]^{\mathrm{T}}$ 达到最小值。此时，映射 $t \mapsto \|Mt\|_2$ 在单位球面 $\mathcal{S}^1 = \{t \in R^2 : \|t\|_2 = 1\}$ 达到最小值。

命题 7.3.1 表明，距离平方和 $D(a,b,\bar{x},\bar{y})$ 有一个最小值。下面的定理给出了如何获得这一最小距离平方和的方法。

定理 7.3.1 [335] 若 2×1 法向量 t 取作与 2×2 矩阵 $M^{\mathrm{T}}M$ 的最小特征值 σ_2^2 对应的特征向量，则距离平方和 $D(a,b,\bar{x},\bar{y})$ 取最小值 σ_2^2。

证明 根据 $n\times 2$ 矩阵 M 的定义易知，2×2 矩阵 $M^{\mathrm{T}}M$ 是一个实的对称半正定矩阵。令其特征值分解为

$$
M^{\mathrm{T}}M = U\Sigma U^{\mathrm{T}} = [u_1, u_2]\begin{bmatrix} \sigma_1^2 & 0 \\ 0 & \sigma_2^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} u_1^{\mathrm{T}} \\ u_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}
$$

式中，$\sigma_1 > \sigma_2$。于是，有

$$
\begin{aligned}
D(a,b,\bar{x},\bar{y}) &= \|Mt\|_2^2 = t^{\mathrm{T}}M^{\mathrm{T}}Mt = t^{\mathrm{T}}U\Sigma U^{\mathrm{T}}t \\
&= (U^{\mathrm{T}}t)^{\mathrm{T}}\Sigma(U^{\mathrm{T}}t) = \sigma_1^2|(U^{\mathrm{T}}t)_1|^2 + \sigma_2^2|(U^{\mathrm{T}}t)_2|^2 \\
&\geqslant \sigma_2^2\left[|(U^{\mathrm{T}}t)_1|^2 + |(U^{\mathrm{T}}t)_2|^2\right] = \sigma_2^2\|U^{\mathrm{T}}t\|_2^2
\end{aligned}
$$

由于向量范数相对于正交矩阵是不变的，即 $\|U^{\mathrm{T}}t\|_2 = \|t\|_2$，并且命题 7.3.1 已经得到向量 t 的 Euclidean 范数等于 1，故 $D(a,b,\bar{x},\bar{y}) \geqslant \sigma_2^2\|U^{\mathrm{T}}t\|_2^2$ 简化为

$$D(a,b,\bar{x},\bar{y}) \geqslant \sigma_2^2 \tag{1}$$

另一方面，易知

$$D(a,b,\bar{x},\bar{y}) = t^{\mathrm{T}}M^{\mathrm{T}}Mt = t^{\mathrm{T}}[u_1,u_2]\begin{bmatrix}\sigma_1^2 & 0\\ 0 & \sigma_2^2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}u_1^{\mathrm{T}}\\ u_2^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}t = \sigma_1^2\left\|u_1^{\mathrm{T}}t\right\|_2^2 + \sigma_2^2\left\|u_2^{T}t\right\|_2^2$$

注意到 t, u_1, u_2 的 Euclidean 范数均等于 1，且特征向量 u_1 和 u_2 相互正交，立即有

$$D(a,b,\bar{x},\bar{y}) = \sigma_1^2\left\|u_1^{\mathrm{T}}t\right\|_2^2 + \sigma_2^2\left\|u_2^{\mathrm{T}}t\right\|_2^2 = \sigma_2^2,\quad 若\ t = u_2 \tag{2}$$

综合式 (1) 和式 (2) 知，当 $t = u_2$ 时，距离平方和 $D(a,b,\bar{x},\bar{y})$ 取最小值 σ_2^2。 ■

文献 [335] 给出的定理证明不严密，上面给出的是改进后的证明。事实上，利用 $\|t\|_2 = 1$ 的约定，距离平方和 $D(a,b,\bar{x},\bar{y})$ 可以写作

$$D(a,b,\bar{x},\bar{y}) = \frac{t^{\mathrm{T}}M^{\mathrm{T}}Mt}{t^{\mathrm{T}}t} \tag{7.3.11}$$

这是典型的 Rayleigh 商形式。在第 8 章 8.9 节学习过 Rayleigh 商后，利用 Rayleigh 商的性质，将可以直接证明定理 7.3.1。

下面的例子有助于我们进一步理解总体最小二乘拟合与一般的最小二乘拟合之间的差别。

例 7.3.1 已知三个数据点 $(2,1),(2,4),(5,1)$。计算中心点，得

$$\bar{x} = \frac{1}{3}(2+2+5) = 3,\quad \bar{y} = \frac{1}{3}(1+4+1) = 2$$

减去这些均值后，得到零均值的数据矩阵

$$M = \begin{bmatrix}2-3 & 1-2\\ 2-3 & 4-2\\ 5-3 & 1-2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}-1 & -1\\ -1 & 2\\ 2 & -1\end{bmatrix}$$

从而有

$$M^{\mathrm{T}}M = \begin{bmatrix}6 & -3\\ -3 & 6\end{bmatrix}$$

其特征值分解为

$$M^{\mathrm{T}}M = \begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}9 & 0\\ 0 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}6 & -3\\ -3 & 6\end{bmatrix}$$

因此，法向量 $t = [a,b]^{\mathrm{T}} = [1/\sqrt{2}, 1\sqrt{2}]^{\mathrm{T}}$。最后，得总体最小二乘拟合的直线方程为

$$a(x-\bar{x}) + b(y-\bar{y}) = 0 \Rightarrow \frac{1}{\sqrt{2}}(x-3) + \frac{1}{\sqrt{2}}(y-2) = 0$$

即 $y=-x+5$。此时，距离平方和为

$$D_{\text{TLS}}(a,b,\bar{x},\bar{y})=\|\boldsymbol{Mt}\|_2^2=\left\|\begin{bmatrix}-1 & -1\\ -1 & 2\\ 2 & -1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}\\ \frac{1}{\sqrt{2}}\end{bmatrix}\right\|_2^2=3$$

与总体最小二乘拟合不同，若最小二乘拟合的代价函数取

$$\begin{aligned}D_{\text{LS}}^{(1)}(m,\bar{x},\bar{y})&=\sum_{i=1}^{3}[m(x_i-\bar{x})+(y_i-\bar{y})]^2\\&=(-m-1)^2+(-m+2)^2+(2m-1)^2\end{aligned}$$

令

$$\frac{\partial D_{\text{LS}}^{(1)}(m,\bar{x},\bar{y})}{\partial m}=6m-3=0$$

得 $m=1/2$, 即斜率为 $-1/2$。此时，最小二乘拟合的直线方程为 $\frac{1}{2}(x-3)+(y-2)=0$，即 $x+2y-7=0$，相应的距离平方和 $D_{\text{LS}}^{(1)}(m,\bar{x},\bar{y})=4.5$。

类似地，若最小二乘拟合采用代价函数

$$\begin{aligned}D_{\text{LS}}^{(2)}(m,\bar{x},\bar{y})&=\sum_{i=1}^{3}[m(y_i-\bar{y})+(x_i-\bar{x})]^2\\&=(-m-1)^2+(2m-1)^2+(-m+2)^2\end{aligned}$$

则使得 $D_{\text{LS}}^{(2)}(m,\bar{x},\bar{y})$ 最小的 $m=\frac{1}{2}$，即拟合的直线方程为 $2x-y-4=0$，相应的距离平方和 $D_{\text{LS}}^{(2)}(m,\bar{x},\bar{y})=4.5$。

图 7.3.1 画出了使用总体最小二乘方法和两种最小二乘方法拟合直线的结果。

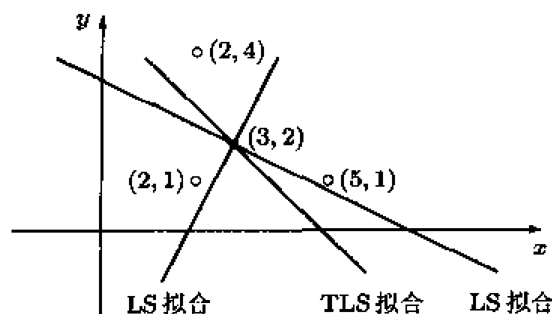


图 7.3.1 最小二乘拟合直线与总体最小二乘拟合直线

这个例子表明，$D_{\text{LS}}^{(1)}(m,\bar{x},\bar{y})=D_{\text{LS}}^{(2)}(m,\bar{x},\bar{y})>D_{\text{TLS}}(a,b,\bar{x},\bar{y})$，即两种最小二乘拟合具有相同的拟合误差偏差，它们比总体最小二乘的拟合偏差大。可见，总体最小二乘拟合确实比最小二乘拟合的精度高。

定理 7.3.1 很容易推广到高维数据情况。令 n 个数据向量 $\boldsymbol{x}_i=[x_{1i},x_{2i},\cdots,x_{mi}]^{\mathrm{T}},i=1,2,\cdots,n$ 分别为 m 维数据，并且

$$\bar{\boldsymbol{x}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i=[\bar{x}_1,\bar{x}_2,\cdots,\bar{x}_m]^{\mathrm{T}} \tag{7.3.12}$$

为均值 (即中心) 向量，式中，$\bar{x}_j=\sum_{i=1}^{n}x_{ji}$。现在考虑使用 m 维法向量 $\boldsymbol{r}=[r_1,r_2,\cdots,r_m]^{\mathrm{T}}$ 对已知的数据向量，拟合超平面 (syperplane) $\boldsymbol{x}$，即 $\boldsymbol{x}$ 满足法方程

$$\langle\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{r}\rangle=0 \tag{7.3.13}$$

构造 $n\times m$ 矩阵

$$\boldsymbol{M}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_1-\bar{\boldsymbol{x}}\\ \boldsymbol{x}_2-\bar{\boldsymbol{x}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{x}_n-\bar{\boldsymbol{x}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}x_{11}-\bar{x}_1 & x_{12}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{1m}-\bar{x}_m\\ x_{21}-\bar{x}_1 & x_{22}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{2m}-\bar{x}_m\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ x_{n1}-\bar{x}_1 & x_{n2}-\bar{x}_2 & \cdots & x_{nm}-\bar{x}_m\end{bmatrix} \tag{7.3.14}$$

则可以得到拟合 m 维超平面的总体最小二乘算法如下。

算法 7.3.1 (m 维超平面拟合的总体最小二乘算法) [335]

已知　n 个数据向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_n$

步骤 1　计算均值向量 $\bar{\boldsymbol{x}}=\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{x}_i$。

步骤 2　利用式 (7.3.14) 构造 $n\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{M}$。

步骤 3　计算 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}$ 的最小特征值及其对应的特征向量 $\boldsymbol{u}$，并令 $\boldsymbol{r}=\boldsymbol{u}$。

结果　由法方程 $\langle\boldsymbol{x}-\bar{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{r}\rangle=0$ 确定的超平面可以使得距离平方和 $D(\boldsymbol{r},\bar{\boldsymbol{x}})$ 最小。

距离平方和 $D(\boldsymbol{r},\bar{\boldsymbol{x}})$ 实际上代表了各个已知数据向量 (点) 到达超平面的距离平方和。因此，距离平方和最小，意味着拟合误差平方和最小。

需要注意的是，如果矩阵 $\boldsymbol{M}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{M}$ 的最小特征值 (或者 $\boldsymbol{M}$ 的最小奇异值) 具有多重度，则与之对应的特征向量也有多个，从而导致拟合超平面存在多个解。这种情况的发生或许昭示线性数据拟合模型可能不合适，而应该尝试其他的非线性拟合模型。

7.3.2 频率估计的总体最小二乘法

考虑下列情况：接收信号是复正弦波与复值高斯白噪声的线性叠加

$$x(n)=\sum_{k=1}^{M}A_k\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,2\pi f_k n}+w(n) \tag{7.3.15}$$

其中，$\{x(n)\}$ 为观测数据，f_k 与 A_k 分别是第 k 个正弦波的频率与振幅。

如果没有噪声存在，即 $w(n)\equiv 0$，则 Prony 方法可以用来确定振幅和频率。应用 Prony 方法时，首先形成一线性差分方程

$$\sum_{i=1}^{M}c_i x(M+n-i)=x(M+n),\qquad n=0,1,\cdots,N-M-1 \tag{7.3.16}$$

式中，$\{c_i\}$ 为下列特征多项式的系数：

$$z^M - c_1 z^{M-1} - \cdots - c_{M-1} z - c_M = 0 \tag{7.3.17}$$

因此，问题是如何估计系数 $\{c_i\}$。一旦 $\{c_i\}$ 估计出来，特征多项式 (7.3.17) 的根 $z_i = \mathrm{e}^{\pm\mathrm{j}\,2\pi f_i}$ 即给出频率 f_i。得到频率之后，又可以利用线性方程 $y(n) = \sum_{k=1}^{M} A_k \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,2\pi f_k n}$ 求出谐波信号的幅值 $\{A_k\}_{k=1}^{M}$。

对于式 (7.3.15) 的有噪声情况，式 (7.3.16) 不成立。就是说，Prony 方法不适用于有加性白噪声的情况。此时，考虑下列线性预测方程：

$$\begin{bmatrix} x(0) & x(1) & \cdots & x(L-1) \\ x(1) & x(2) & \cdots & x(L) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x(N-L-1) & x(N-L) & \cdots & x(N-2) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_L \\ c_{L-1} \\ \vdots \\ c_1 \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} x(L) \\ x(L+1) \\ \vdots \\ x(N-1) \end{bmatrix} \tag{7.3.18}$$

或

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{c} \approx \boldsymbol{b} \tag{7.3.19}$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 是线性预测数据矩阵，$\boldsymbol{c}$ 为线性预测向量，$\boldsymbol{b}$ 为观测向量，并且 $L > M$。显然，可以构造增广矩阵 $\boldsymbol{B} = [-\boldsymbol{b}, \boldsymbol{A}]$，应用 SVD-TLS 算法求解矩阵方程 (7.3.19) 确定线性预测器系数 $\{c_i\}_{i=1}^{L}$ 的总体最小二乘解；然后通过式 (7.3.17) 估计 L 个“正弦波”，其中，单位模的 M 个根给出真实正弦波的频率，其他根则对应为伪正弦波。这种 TLS-Prony 方法是 Rahman 和 Yu 提出的 [380]。该方法的缺点是，当数据长度较大时，数据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行数太大；而且为了得到预测系数好的结果，通常需要将线性预测器阶数取得很大，即 $L \approx \dfrac{N}{3}$。结果是，需要求解一个大维数的增广矩阵的总体最小二乘解，使计算量显得太大。

为了大大减少 TLS-Prony 方法的计算量，一种合理的选择是在应用 TLS-Prony 方法之前进行所谓的数据抽取。这种使用数据抽取的修正 TLS-Prony 方法是 Steedly 等人提出的 [426]。下面介绍这一方法。

假定有数据向量 $y(t)$ 的 N 个“快拍”，每一个具有长度 m，即

$$\boldsymbol{y}(t) = [y_0(t), y_1(t), \cdots, y_{m-1}(t)]^{\mathrm{T}}, \qquad t = 1, 2, \cdots, N \tag{7.3.20}$$

每个数据向量的数学模型都是噪声中的指数序列：

$$y_q(t) = \sum_{i=1}^{n} x_i(t) p_i^q + e_q(t), \qquad q = 0, 1, \cdots, m-1 \tag{7.3.21}$$

在数据中有 n 个各异的指数模态；n 个极点 $\{p_i\}_{i=1}^{n}$ 不随快拍改变，但幅值 $x_i(t)$ 可变。这里，假设 $\{e_q(t)\}$ 是不相关的零均值复高斯白噪声序列，其方差为 σ。方程 (7.3.21) 可以紧凑地写作

$$\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t) + \boldsymbol{e}(t) \tag{7.3.22}$$

其中

$$\boldsymbol{e}(t)=[e_0(t),e_1(t),\cdots,e_{m-1}(t)]^{\mathrm{T}}$$
$$\boldsymbol{x}(t)=[x_0(t),x_1(t),\cdots,x_{m-1}(t)]^{\mathrm{T}}$$

而$\boldsymbol{A}$是一个 $m\times n$ 维 Vandermonde 矩阵：

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1 & \cdots & 1\\ p_1 & p_2 & \cdots & p_n\\ p_1^2 & p_2^2 & \cdots & p_n^2\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ p_1^{m-1} & p_2^{m-1} & \cdots & p_n^{m-1}\end{bmatrix} \tag{7.3.23}$$

令 $\boldsymbol{K}$ 是一个 l 阶 FIR 滤波器，它对由式 (7.3.17) 定义的 $m\times 1$ 数据向量 $\boldsymbol{y}(t)$ 进行滤波：

$$\boldsymbol{y}'(t)=\boldsymbol{K}\boldsymbol{y}(t) \tag{7.3.24}$$

其中，$\boldsymbol{K}$ 是一个 $(m-l)\times m$ 矩阵，且

$$\boldsymbol{K}=\begin{bmatrix}k_l & k_{l-1} & k_{l-2} & \cdots & k_0 & 0 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & k_l & k_{l-1} & \cdots & k_1 & k_0 & 0 & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & 0 & k_l & k_{l-1} & \cdots & k_1 & k_0 & 0\\ 0 & \cdots & 0 & 0 & k_l & \cdots & k_2 & k_1 & k_0\end{bmatrix} \tag{7.3.25}$$

这里，$\{k_i\}_{i=0}^{l}$ 是 FIR 滤波器的冲激响应序列。注意，得到的滤波后的序列长度为 $m-l$，它不包括前 l 个瞬时点。由 $y_q'(t)$ 可以定义一组抽取序列：

$$y_q'^u(t)=y_{qd+u}'(t),\qquad q=0,1,\cdots,m_d'-1,\ u=0,1,\cdots,d-1 \tag{7.3.26}$$

其中，$m_d'=\left\lfloor\dfrac{m-l}{d}\right\rfloor$ 为整数，指标 u 给出了数据抽取中的起始点。因此，对于固定的 t，序列 $\{y_q'^u(t)\}$ 表示从 $y'(t)$ 抽取的一组交叉序列。这些序列有时称为多相位分量 [456]。由式 (7.3.21) 和式 (7.3.26) 可以看出，每一个序列 $\{y_q'^u(t)\}$ 都是一个噪声中的指数序列，其形式为

$$y_q'^u(t)=\sum_{i=1}^{n}x_i'^u(t)(p_i')^q+e_q''^u(t) \tag{7.3.27}$$

其中，$\{e_q''^u(t)\}$ 为 $e(t)$ 经滤波和抽取后的序列，且

$$p_i'=(p_i)^d$$

和

$$x_i'^u(t)=x_i(t)p_i^{(u+l)}K(p_i) \tag{7.3.28}$$

这里 $K(z)$ 是 FIR 滤波器多项式：

$$K(z)=k_0+k_1z^{-1}+k_2z^{-2}+\cdots+k_lz^{-l} \tag{7.3.29}$$

FIR 滤波在新模型中的影响是使原来的白噪声变成有色的。通常，选择 $\boldsymbol{K}$ 为带通滤波器。通过仔细选择 FIR 滤波器，可以明显地减少某些感兴趣的带宽以外的模态幅值系数。在这种情况下，就可以假定滤波后的数据中的“有效模态”个数为 n'，它小于 n。于是，有下列模型：

$$y_q'^u(t) = \sum_{i=1}^{n'} x_i'^u(t)(p_i')^q + e_q'^u(t) \tag{7.3.30}$$

其中，$e_q'^u(t) = \sum_{i=n'+1}^{n} x_i'^u(t)(p_i')^q + e_q''^u(t)$ 包含了噪声 $e_q''^u(t)$ 和 $n-n'$ 个残余模态信号。因此，噪声 $e_q'^u(t)$ 是高斯有色噪声，具有非零的均值。非零均值的影响是在参数估计值中引入某些偏差。

交叉数据组可以丢弃不用，以便减少参数估计的计算量，即式 (7.3.26) 中的 u 可以只取 1。从 Nyquist 理论的观点看，如果理想的低通滤波器可以实现，则丢弃交叉数据不会招致性能的任何损失。然而，对于实际应用而言，由于非理想滤波器的缘故，将会损失某些性能。原则上，可以通过保留所有的交叉数据补偿非理想滤波的影响。不过，这种性能补偿并不明显。现在考虑只保留一组交叉数据，因为只保留一组而丢弃所有其他的交叉数据组很容易并入到矩阵 $\boldsymbol{K}$ 中。

现在只有 N 个被抽取过的多快拍序列，因此，TLS-Prony 算法可以应用于式 (7.3.27) 以得到估计值 $\{\hat{p}_i'\}$ 和 $\{\hat{x}_i'^0(t)\}$。于是，数据抽取后的多快拍后向预测方程由下式给出：

$$[\boldsymbol{y}'^0, \boldsymbol{Y}'^0]\begin{bmatrix}1\\ \boldsymbol{b}'\end{bmatrix} \approx \boldsymbol{0} \tag{7.3.31}$$

其中，$\boldsymbol{b}' = [b_1', b_2', \cdots, b_L']^{\mathrm{T}}$，且

$$[\boldsymbol{y}'^0, \boldsymbol{Y}'^0] = \begin{bmatrix}
y_0'(1) & y_d'(1) & y_{2d}'(1) & \cdots & y_{Ld}'(1)\\
y_d'(1) & y_{2d}'(1) & y_{3d}'(1) & \cdots & y_{(L+1)d}'(1)\\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\
y_{m_d'-(L+1)d}'(1) & y_{m_d'-Ld}'(1) & y_{m_d'-(L-1)d}'(1) & \cdots & y_{m_d'-d}'(1)\\
y_0'(2) & y_d'(2) & y_{2d}'(2) & \cdots & y_{Ld}'(2)\\
y_d'(2) & y_{2d}'(2) & y_{3d}'(2) & \cdots & y_{(L+1)d}'(2)\\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\
y_{m_d'-(L+1)d}'(2) & y_{m_d'-Ld}'(2) & y_{m_d'-(L-1)d}'(2) & \cdots & y_{m_d'-d}'(2)\\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\
y_0'(N) & y_d'(N) & y_{2d}'(N) & \cdots & y_{Ld}'(N)\\
y_d'(N) & y_{2d}'(N) & y_{3d}'(N) & \cdots & y_{(L+1)d}'(N)\\
\vdots & \vdots & \vdots & & \vdots\\
y_{m_d'-(L+1)d}'(N) & y_{m_d'-Ld}'(N) & y_{m_d'-(L-1)d}'(N) & \cdots & y_{m_d'-d}'(N)
\end{bmatrix} \tag{7.3.32}$$

其中，L 为预测阶数，$\boldsymbol{b}'$ 为多项式

$$B'(z) = 1 + b_1'z + b_2'z^2 + \cdots + b_L'z^L = 0 \tag{7.3.33}$$

的系数向量。注意，L 的选择影响系数 b'_i 的精度。

TLS-Prony 方法考虑 $\boldsymbol{Y}'^0$ 和 $\boldsymbol{y}'^0$ 两者的噪声扰动的影响，而且 TLS 解试图使这些扰动对预测系数向量 $\boldsymbol{b}'$ 的影响极小化。这一极小化是通过增广矩阵 $[\boldsymbol{y}'^0, \boldsymbol{Y}'^0]$ 的奇异值分解，并将除前面 n' 个主要奇异值以外的其他奇异值截除，以得到估计值 $[\hat{\boldsymbol{y}}'^0, \hat{\boldsymbol{Y}}'^0]$。

将 $[\hat{\boldsymbol{y}}'^0, \hat{\boldsymbol{Y}}'^0]$ 代入式 (7.3.29) 给出修正的预测方程

$$\hat{\boldsymbol{Y}}'^0\hat{\boldsymbol{b}}' \approx -\hat{\boldsymbol{y}}'^0 \tag{7.3.34}$$

由此得到线性预测系数向量的估计：

$$\hat{\boldsymbol{b}}' = -(\hat{\boldsymbol{Y}}'^0)^{\dagger}\hat{\boldsymbol{y}}'^0 \tag{7.3.35}$$

最后，抽取的极点的估计为

$$\hat{p}'_i = \hat{B}'(z)\ \text{的第}\ i\ \text{个零点}, \qquad i = 1, 2, \cdots, L \tag{7.3.36}$$

一般说来，由 $\hat{p}'_i$ 不能恢复 $\hat{p}_i$，因为映射 $p_i \mapsto p_i^d$ 不是一对一的。然而，如果对 p_i 的区域作适当的限制，则映射可以做到一对一。例如，若事先已知 $\angle p_i \in \left(-\frac{\pi}{d}, \frac{\pi}{d}\right)$，则 $\hat{p}_i$ 可以由 $\hat{p}'_i$ 唯一恢复：

$$\hat{p}_i = (\hat{p}'_i)^{1/d} \tag{7.3.37}$$

为了在没有任何先验信息的情况下满足区域限制要求，可选择一合适的 FIR 滤波器。

一旦极点求出后，对应的振幅系数可以利用式 (7.3.30) 和式 (7.3.28)，根据抽取的极点估计值和抽取的数据进行估计。注意，根据抽取的极点估计值和抽取的数据进行振幅估计在计算上更有效，因为这对应更短的数据长度和更少的极点数。具体地说，式 (7.3.30) 导致了下述振幅系数的线性方程：

$$\hat{\boldsymbol{A}}'_L\hat{\boldsymbol{K}}_p\hat{\boldsymbol{X}} = \boldsymbol{Y}'^0_a \tag{7.3.38}$$

式中

$$\hat{\boldsymbol{A}}'_L = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \hat{p}'_1 & \hat{p}'_2 & \cdots & \hat{p}'_L \\ \hat{p}'^2_1 & \hat{p}'^2_2 & \cdots & \hat{p}'^2_L \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \hat{p}'^{(m'_d-1)}_1 & \hat{p}'^{(m'_d-1)}_2 & \cdots & \hat{p}'^{(m'_d-1)}_L \end{bmatrix} \tag{7.3.39}$$

$$\hat{\boldsymbol{K}}_p = \text{diag}\left(\hat{p}'^l_1 K(\hat{p}_1), \hat{p}'^l_2 K(\hat{p}_2), \cdots, \hat{p}'^l_L K(\hat{p}_L)\right) \tag{7.3.40}$$

和

$$\hat{\boldsymbol{X}} = \begin{bmatrix} \hat{x}_1(1) & \hat{x}_1(2) & \cdots & \hat{x}_1(N) \\ \hat{x}_2(1) & \hat{x}_2(2) & \cdots & \hat{x}_2(N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \hat{x}_L(1) & \hat{x}_L(2) & \cdots & \hat{x}_L(N) \end{bmatrix} \tag{7.3.41}$$

$$\boldsymbol{Y}'^0_a = [y'^0(1), y'^0(2), \cdots, y'^0(N)] \tag{7.3.42}$$

于是，振幅系数可以由式 (7.3.38) 的最小二乘解求出，即

$$\hat{\boldsymbol{X}} = \hat{\boldsymbol{K}}_p^{-1}(\hat{\boldsymbol{A}}_L'^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{A}}_L')^{-1}\hat{\boldsymbol{A}}_L'^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Y}_a'^{0} \tag{7.3.43}$$

实际中，通常不用上式，而用某些数值上更好的方法 (例如 QR 分解) 求解式 (7.3.38)。

由于只有 $\hat{\boldsymbol{Y}}'^{0}$ 的 n' 个奇异值不为零，所以至多可以有 n' 个极点估计与真实的数据模态相对应。也就是说，只有 n' 个具有最大能量的极点被保留 [427]。于是，可以再次估计这 n' 个极点，方法是：删去矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}_L'$ 中除 n' 个“高能量极点”列以外的所有列，然后重新计算最小二乘解 $\hat{\boldsymbol{X}}$。

有必要指出，式 (7.3.15) 所示复值噪声中的复正弦波的频率也可以用 ARMA 建模的总体最小二乘算法进行估计。可以证明 [520]，式 (7.3.15) 对应于下列特殊的 ARMA(M,M) 模型 (AR 和 MA 参数相同)：

$$\sum_{i=0}^{M} a_i y(n-i) = \sum_{i=0}^{M} a_i w(n-i) \tag{7.3.44}$$

其中，$a_i = 1$，而且 AR 参数 $a_i, i=1,2,\cdots,M$ 的特征多项式

$$A(z) = z^M + a_1 z^{M-1} + \cdots + a_{M-1}z + a_M = 0 \tag{7.3.45}$$

的 M 个复根 $z_i = \mathrm{e}^{\mathrm{j}2\pi f_i}, i=1,2,\cdots,M$ 给出复正弦波频率。虽然 AR 和 MA 参数完全相同，但是 ARMA 建模方法仍然适用于模型 (7.3.44)，参见文献 [520, p.119]。因此，可以用 SVD-TLS 算法求解式 (7.3.44) 得到 AR 系数 a_i。这就是谐波恢复的 ARMA 建模的 SVD-TLS 算法。这种方法处理的相关矩阵比 TLS-Prony 方法处理的数据矩阵维数小得多。

7.3.3 FIR 自适应滤波的总体最小二乘算法

考虑输入向量噪声在自适应滤波应用 (冲激响应估计) 中发生的可能性。在冲激响应估计中，自适应滤波器试图根据系统的输入与输出估计未知系统的冲激响应。冲激响应估计的应用包括：根据目标对冲激或斜坡形状的电磁脉冲的响应确定雷达目标的特征 [316],[334]，估计地壳的地质结构的反射地震仪 [476],[309]，通信信道的冲激响应估计 [374]，数字波形编码器的特征描述 [376] 等。考虑图 7.3.2 所示的冲激响应估计结构。未知的系统冲激响应假定为 $M\times 1$ 向量

$$\boldsymbol{\theta}^* = [b_0^*, b_1^*, \cdots, b_{M-1}^*]^{\mathrm{T}} \tag{7.3.46}$$

假设这些响应是时不变的。“期望”信号由

$$d(t) = \boldsymbol{\phi}_t^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta}^* n_o(t) \tag{7.3.47}$$

给出。其中，观测噪声 $n_o(t)$ 为零均值、方差为 σ_o^2 的白噪声过程，与输入向量独立。输入向量

$$\boldsymbol{\phi}_t = [x(t), x(t-1), \cdots, x(t-M+1)]^{\mathrm{T}} \tag{7.3.48}$$

自适应滤波器的输入通常也取 ϕ_t。由于未知系统的输入必须与期望信号一起采样和量化，因此会产生宽带的量化噪声，它将污染自适应滤波器输入。这表明，在自适应滤波应用中，输入向量通常存在噪声，如图 7.3.2 所示。

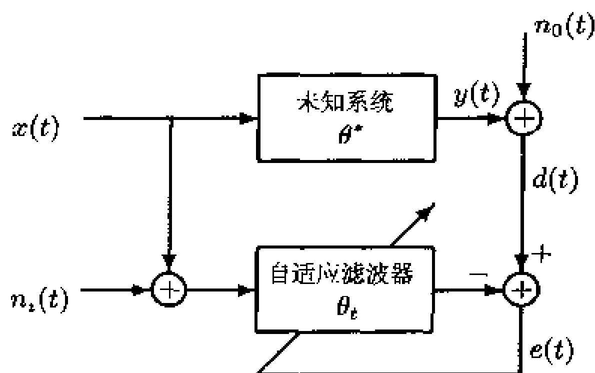


图 7.3.2 输入向量存在噪声 $n_i(t)$ 的冲激响应估计结构

对于图 7.3.2，递推时间 t 的法方程为

$$\boldsymbol{R}_t\boldsymbol{\theta}_t = \boldsymbol{p}_t \tag{7.3.49}$$

式中

$$\boldsymbol{R}_t = \frac{1}{t}\sum_{j=1}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y}_j\boldsymbol{y}_j^T, \qquad \boldsymbol{p}_t = \frac{1}{t}\sum_{j=1}^{\mathrm{T}} d(j)\boldsymbol{y}_j \tag{7.3.50}$$

这里，$\boldsymbol{y}_j$ 表示自适应滤波器 j 时间的含噪声输入向量：

$$\boldsymbol{y}_j = [x(j)+n_i(j), x(j-1)+n_i(j-1),\cdots,x(j-M+1)+n_i(j-M+1)]^{\mathrm{T}} \tag{7.3.51}$$

而 $d(j)$ 是在时间 j 的期望响应，为

$$d(j) = \boldsymbol{\phi}_j^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\theta}^* n_0(j) \tag{7.3.52}$$

未知 FIR 系统冲激响应由式 (7.3.46) 表示，时间 j 的系统 (无噪声) 输入向量则为

$$\boldsymbol{\phi}_j = [x(j), x(j-1),\cdots,x(j-M+1)]^{\mathrm{T}} \tag{7.3.53}$$

假定 t 足够大，使得式 (7.3.50) 的确定量可以分别用期望值代替：

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{y}_t\boldsymbol{y}_t^{\mathrm{T}}\} = \boldsymbol{R}_\phi + \sigma_i^2\boldsymbol{I}_M \tag{7.3.54}$$

$$\mathrm{E}\{d(t)\boldsymbol{y}_t\} \equiv \boldsymbol{p} = \boldsymbol{R}_\phi\boldsymbol{\theta}^* \tag{7.3.55}$$

式中

$$\boldsymbol{R}_\phi = \mathrm{E}\{\boldsymbol{\phi}_t\boldsymbol{\phi}_t^{\mathrm{T}}\} \tag{7.3.56}$$

于是，法方程 (7.3.49) 可以写作

$$(\boldsymbol{R}_\phi + \sigma_i^2\boldsymbol{I}_M)\boldsymbol{\theta}_t = \boldsymbol{R}_\phi\boldsymbol{\theta}^* \tag{7.3.57}$$

式 (7.3.57) 是令人感兴趣的。如果没有输入向量噪声，即 $\sigma_i^2 = 0$，则式 (7.3.57) 的最小二乘解为 $\boldsymbol{\theta}_t = \boldsymbol{\theta}^*$，即它是无偏的。一般情况下，式 (7.3.57) 的最小二乘解由下式给出：

$$\boldsymbol{\theta}_t = (\boldsymbol{R}_\phi + \sigma_i^2 \boldsymbol{I}_M)^{-1} \boldsymbol{R}_\phi \boldsymbol{\theta}^* \tag{7.3.58}$$

$\boldsymbol{\theta}_t$ 可以用递推最小二乘算法自适应估计。假定输入数据 $x(t)$ 是一个阶数至少为 M 的持续激励随机过程，则自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_\phi$ 是正定的。因此，对 $\boldsymbol{R}_\phi + \sigma_i^2 \boldsymbol{I}_M$ 应用矩阵求逆引理，则有

$$(\boldsymbol{R}_\phi + \sigma_i^2 \boldsymbol{I}_M)^{-1} = \boldsymbol{R}_\phi^{-1} - \boldsymbol{R}_\phi^{-1}(\boldsymbol{R}_\phi^{-1} + \sigma_i^{-2} \boldsymbol{I}_M)^{-1} \boldsymbol{R}_\phi^{-1} \tag{7.3.59}$$

将式 (7.3.59) 代人式 (7.3.58) 得到

$$\boldsymbol{\theta}_t = \boldsymbol{\theta}^* + \boldsymbol{R}_\phi^{-1}(\boldsymbol{R}_\phi^{-1} + \sigma_i^{-2} \boldsymbol{I}_M)^{-1} \boldsymbol{\theta}^* \tag{7.3.60}$$

显然，这种递推最小二乘的偏差项为

$$\boldsymbol{\theta}_{\text{bias}} = \boldsymbol{R}_\phi^{-1}(\boldsymbol{R}_\phi^{-1} + \sigma_i^{-2} \boldsymbol{I}_M)^{-1} \boldsymbol{\theta}^* \tag{7.3.61}$$

令 $\bar{\boldsymbol{D}}$ 为一对称矩阵，且 $\bar{\boldsymbol{\theta}}_\perp = [1, -\theta^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}$，其中

$$\boldsymbol{\theta} = [b_0, b_1, \cdots, b_{M-1}]^{\mathrm{T}} \tag{7.3.62}$$

考虑下面的极小化问题：

$$\min_{\theta} \frac{1}{t} \sum_{j=1}^{t} \frac{\bar{\boldsymbol{\theta}}_\perp^{\mathrm{T}} \bar{\boldsymbol{y}}_j \bar{\boldsymbol{y}}_j^{\mathrm{T}} \bar{\boldsymbol{\theta}}_\perp}{\bar{\boldsymbol{\theta}}_\perp^{\mathrm{T}} \bar{\boldsymbol{D}} \bar{\boldsymbol{\theta}}_\perp} \tag{7.3.63}$$

容易验证，若令 $(M+1) \times (M+1)$ 矩阵 $\bar{\boldsymbol{D}} = \begin{bmatrix} 1 & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}$，则极小化问题为最小二乘问题；若令 $\bar{\boldsymbol{D}} = \begin{bmatrix} 1 & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix}$，则极小化问题为总体最小二乘问题。

令

$$\bar{\boldsymbol{D}} = \begin{matrix} \begin{bmatrix} \beta & \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{0} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{matrix} 1 \\ M \end{matrix} \\ \begin{matrix} 1 & M \end{matrix} \end{matrix} \tag{7.3.64}$$

其中

$$\beta = \frac{\sigma_o^2}{\sigma_i^2} \tag{7.3.65}$$

Davila 证明了下述定理 [109]。

定理 7.3.2 当滤波器输入含有零均值的加性白噪声时，由式 (7.3.63)~ 式 (7.3.65) 给出的总体最小二乘解 $\boldsymbol{\theta}_t^*$ 将给出渐近无偏和一致的 FIR 参数估计，并且与总体最小二乘估计对应的“总体”均方误差为 $\lambda_{\min}^*(t) = \sigma_i^2$。

对上述总体最小二乘具体算法感兴趣的读者可进一步参阅文献 [109]。

除了上述应用外，总体最小二乘已在下列领域获得了广泛的应用：信号处理 [248],[524]，生物医学信号处理 [461]，图像处理 [332]，变量误差建模 [460],[436]，频域系统辨识 [367],[410]，线性系统的子空间辨识 [464]，天文学 [58]，通信 [345],[523]，雷达系统 [151] 等。

7.4 约束总体最小二乘

由式 (7.2.36)，求解方程 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}$ 的总体最小二乘解可以表示成 $\boldsymbol{x}_{\text{TLS}}=(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A}-\sigma_{\min}^2\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{b}$，其中，$\sigma_{\min}^2$ 是扰动矩阵 $\boldsymbol{D}=[-\boldsymbol{e},\boldsymbol{E}]$ 各个噪声分量共同的方差。然而，在一些重要的情况下，$\boldsymbol{D}$ 的噪声分量可能是统计相关的；或者虽然统计不相关，但却具有不同的方差。此时，总体最小二乘不再给出最优的解。例如，当我们试图根据输入和输出估计系统的冲激响应时，$\boldsymbol{D}$ 的噪声分量统计相关的情况便会发生。假定 $y(t)$ 是系统的输出，$u(t)$ 是其输入，则冲激响应可以写成近似方程 [70]

$$\begin{bmatrix} y(t-m) \\ y(t+1-m) \\ \vdots \\ y(t) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} u(t-m) & \cdots & u(t-n-m) \\ u(t+1-m) & \cdots & u(t+1-n-m) \\ \vdots & & \vdots \\ u(t) & \cdots & u(t-n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} h(0) \\ h(1) \\ \vdots \\ h(n) \end{bmatrix} \tag{7.4.1}$$

或用矩阵符号写作

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{h} \tag{7.4.2}$$

式中，$\boldsymbol{U}$ 的噪声分量显然是 Toeplitz 矩阵，但是这种信息并没有被总体最小二乘解所利用。

再看数据矩阵的噪声分量线性相关的另外一个重要的例子：根据被白噪声污染的测量数据估计正弦波频率的前向线性预测 [1]~[3]。具体地，假定测量数据由

$$y_n=\sum_{k=1}^{L}S_k \text{e}^{\text{j}\,2\pi n f_k}+v_n, \qquad n=1,2,\cdots,N \tag{7.4.3}$$

给出，式中，$\{v_n\}$ 是零均值的独立同分布噪声。前向线性预测方程为

$$\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}=\boldsymbol{0} \tag{7.4.4}$$

其中

$$\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_{L+1} \\ y_2 & y_3 & \cdots & y_{L+2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_{N-L} & y_{N-L+1} & \cdots & y_N \\ \hline y_{L+1}^* & y_L^* & \cdots & y_1^* \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_N^* & y_{N-1}^* & \cdots & y_{N-L}^* \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_L]^{\text{T}}$$

这里，y_t^* 是 y_t 的复数共轭。

观察知，矩阵 $\boldsymbol{C}$ 上半部分具有 Hankel 结构，下半部分具有 Toeplitz 结构。这种结构特征也没有被总体最小二乘方法所利用。为了得到 $\boldsymbol{x}$ 更加精确的估计，Abatzoglou 等

人提出了一种推广的总体最小二乘，并称之为约束总体最小二乘 (constrained total least squares, CTLS) 方法 [1]~[3]。

7.4.1 约束总体最小二乘方法

令

$$\Delta C = [\Delta c_1, \Delta c_2, \cdots, \Delta c_{L+1}]$$

式中，向量 $\Delta c_i \in C^{M\times 1}M$ 是矩阵 ΔC 的第 i 列。设 $\{v_1, v_2, \cdots, v_K\}$ 是独立随机变量的最小代数集合，并满足

$$\Delta c_i = F_i v, \qquad i = 1, 2, \cdots, L+1 \tag{7.4.5}$$

其中，$v = [v_1, v_2, \cdots, v_K]^T$，$F_i$ 是 $M \times K$ 矩阵。如果 v 不是白色的随机向量，则可以应用合适的变换使之白 (色) 化。假定 $R = \mathrm{E}\{vv^H\} = PP^H$ 是矩阵 R 的 Cholesky 分解，于是可以利用

$$u = P^{-1}v \tag{7.4.6}$$

使 v 变换成白噪声向量 u。这样一来，Δc_i 就可以表示为

$$\Delta c_i = F_i P u = G_i u, \qquad i = 1, 2, \cdots, L+1 \tag{7.4.7}$$

式中，$G_i = F_i P \in C^{M\times K}$。

约束总体最小二乘问题可以叙述为：确定一个解向量 x 和最小扰动 u，使得

$$(C + [G_1 u, G_2 u, \cdots, G_{L+1} u]) \begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix} = 0 \tag{7.4.8}$$

数学上，约束总体最小二乘问题可以写作

$$\text{在 } (C + [G_1 u, G_2 u, \cdots, G_{L+1} u]) \begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix} = 0 \text{ 约束条件下，} \quad \min_{u,x} \|u\|^2 \tag{7.4.9}$$

这是一个在二次型约束方程约束下的二次型函数的极小化问题。它可能没有闭式解，但是在适当的条件下，极小化问题可以变换成一个对极小化变量 x 的非约束极小化问题。

为了说明这一点，假定 C 的噪声等于零。此时，有方程 $C_0 \begin{bmatrix} x_0 \\ -1 \end{bmatrix} = 0$。这就使得式 (7.4.8) 总有一个解。注意到随机向量 u 的维数 K 必然小于 ΔC 的维数 $M(L+1)$，而且 K 越大，则 ΔC 的分量满足的代数关系的数量就越少。下面的定理 [3] 具体描述了约束极小化问题如何变换为非约束极小化问题。

定理 7.4.1 令

$$W_x = \sum_{i=1}^{L} x_i G_i - G_{L+1} \tag{7.4.10}$$

则约束总体最小二乘的解向量就是满足下列函数极小化的变量 x：

$$\min_x \begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix}^H C^H (W_x^\dagger)^H W_x^\dagger C \begin{bmatrix} x \\ -1 \end{bmatrix} \tag{7.4.11}$$

式中，$\boldsymbol{W}_x^{\dagger}=(\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_x)^{-1}\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}$ 是 $\boldsymbol{W}_x$ 的伪逆矩阵。

证明 注意到

$$[\boldsymbol{G}_1\boldsymbol{u},\cdots,\boldsymbol{G}_{L+1}\boldsymbol{u}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}=\sum_{i=1}^{L}x_i\boldsymbol{G}_i\boldsymbol{u}-\boldsymbol{G}_{L+1}\boldsymbol{u}=\left(\sum_{i=1}^{L}x_i\boldsymbol{G}_i-\boldsymbol{G}_{L+1}\right)\boldsymbol{u} \tag{7.4.12}$$

在代入式 (7.4.10) 之后，式 (7.4.12) 可以重新写作

$$\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}+\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0} \tag{7.4.13}$$

现在，约束总体最小二乘解由满足式 (7.4.13) 的向量 $\boldsymbol{u}$ 的范数平方的极小化

$$\min_{u,x}\|\boldsymbol{u}\|^2$$

给出。对于满足式 (7.4.13) 的任何 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{x}$，易知

$$\|\boldsymbol{u}\|^2\geqslant\min_{u}\|\boldsymbol{u}\|^2=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x^{\dagger})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_x^{\dagger}\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}$$

因为在式 (7.4.13) 的约束条件下，$\min\limits_{u}\|\boldsymbol{u}\|^2$ 的解为 $\boldsymbol{u}=-\boldsymbol{W}_x^{\dagger}\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}$。于是，可以得出结论：约束总体最小二乘解由

$$F(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x^{\dagger})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_x^{\dagger}\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}$$

相对于 $\boldsymbol{x}$ 的极小化给出。 ■

值得指出的是，如果 $M\leqslant K$，并且 $\boldsymbol{W}_x$ 满秩，则 $F(\boldsymbol{x})$ 的表达式可以进一步简化。

1. $K>M$ 时

由于

$$\boldsymbol{W}_x^{\dagger}=\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}$$

所以

$$\begin{aligned}F(\boldsymbol{x})&=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}\\&=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}\end{aligned}$$

2. $M=K$ 时

因 $\boldsymbol{W}_x^{\dagger}=\boldsymbol{W}_x^{-1}$，故

$$F(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{W}_x^{-1}\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}$$

如果 $M>K$ 或者 $\boldsymbol{W}_x$ 秩亏缺，那么为了得到约束总体最小二乘解，就仍然需要进行式 (7.4.11) 的极小化。有关这种情况下的极小化算法可参见文献 [3]。下面将侧重在大多数应用中都能够满足的情况，即 $M\leqslant K$ 和 $\boldsymbol{W}_x$ 满秩的情况。

利用解析方法计算 $F(\boldsymbol{x})$ 的极小化是相当困难的 [3]。下面考虑计算约束总体最小二乘解的 Newton 方法。矩阵 $F(\boldsymbol{x})$ 可以看作是 $2L$ 个实变量 (即 $x_1, x_2, \cdots, x_L$ 的实部和虚部) 的解析函数。为了求 $\boldsymbol{x}_{\text{CTLS}}$，必须使 $F(\boldsymbol{x})$ 相对于这 $2L$ 个变量极小化。在必须计算 $F(\boldsymbol{x})$ 的一阶和二阶偏导数的情况下，为了获得 $F(x)$ 极小化的递推方法，把 $F(x)$ 看作 $2L$ 个复变量 $x_1, \cdots, x_L, x_1^*, \cdots, x_L^*$ 的函数将更加方便，其中，x_i^* 是 x_i 的复数共轭。在计算函数 $F(\boldsymbol{x})$ 的一阶和二阶偏导数的时候，可以将 x_i 和 x_i^* 视为独立的变量。

对于任意一个函数的极小化，最速下降法可能收敛不是很快，因为在选择最优步长时存在不确定性。如果被极小化的函数是二次可微分的，则 Newton 方法是二次或更快速收敛的 [287]。文献 [3] 提出了一种复数形式的 Newton 方法，它利用函数 F 的一阶和二阶偏导数递推确定 F 的极小化变量 $\boldsymbol{x}$。Newton 递推公式如下：

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_0 + (\boldsymbol{A}^*\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}^*)^{-1}(\boldsymbol{a}^* - \boldsymbol{A}^*\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{a}) \tag{7.4.14}$$

式中

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{a} &= \frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{x}} = \left[\frac{\partial F}{\partial x_1}, \frac{\partial F}{\partial x_2}, \cdots, \frac{\partial F}{\partial x_L}\right]^{\mathrm{T}} = F\text{的复梯度} \\
\boldsymbol{A} &= \frac{1}{2}\left[\frac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{x}^2} + \left(\frac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{x}^2}\right)^{\mathrm{T}}\right] = F\text{的无共轭复 Hessian 矩阵} \\
\boldsymbol{B} &= \frac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{x}^* \partial \boldsymbol{x}} = F\text{的共轭复 Hessian 矩阵}
\end{aligned}\right\} \tag{7.4.15}$$

二阶偏导数定义为

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{x}^2} = \left[\frac{\partial^2 F}{\partial x_m \partial x_n}\right]_{m,n} = \left[\frac{1}{4}\left(\frac{\partial F}{\partial x_{mR}} - \mathrm{j}\frac{\partial F}{\partial x_{mI}}\right)\left(\frac{\partial F}{\partial x_{nR}} - \mathrm{j}\frac{\partial F}{\partial x_{nI}}\right)\right]_{m,n} \tag{7.4.16}$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial \boldsymbol{x}^* \partial \boldsymbol{x}} = \left[\frac{\partial^2 F}{\partial x_m^{\mathrm{H}} \partial x_n}\right]_{m,n} = \left[\frac{1}{4}\left(\frac{\partial F}{\partial x_{mR}} + \mathrm{j}\frac{\partial F}{\partial x_{mI}}\right)\left(\frac{\partial F}{\partial x_{nR}} - \mathrm{j}\frac{\partial F}{\partial x_{nI}}\right)\right]_{m,n} \tag{7.4.17}$$

令

$$\boldsymbol{u} = (\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x} \\ -1\end{bmatrix} \tag{7.4.18}$$

$$\tilde{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{C}\boldsymbol{I}_{L+1,L} - [\boldsymbol{G}_1\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}, \cdots, \boldsymbol{G}_L\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}] \tag{7.4.19}$$

$$\tilde{\boldsymbol{G}} = [\boldsymbol{G}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}, \cdots, \boldsymbol{G}_L^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}] \tag{7.4.20}$$

其中，$\boldsymbol{I}_{L+1,L}$ 是一个 $(L+1)\times L$ 对角矩阵，其对角线元素为 1。于是，$\boldsymbol{a}, \boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 可以分别计算如下：

$$\boldsymbol{a} = (\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{B}})^{\mathrm{T}} \tag{7.4.21}$$

$$\boldsymbol{A} = -\tilde{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\tilde{\boldsymbol{B}} - (\tilde{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\tilde{\boldsymbol{B}})^{\mathrm{T}} \tag{7.4.22}$$

$$\boldsymbol{B} = [\tilde{\boldsymbol{B}}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\tilde{\boldsymbol{B}}]^{\mathrm{T}} + \tilde{\boldsymbol{G}}^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{W}_x - \boldsymbol{I}]\tilde{\boldsymbol{G}} \tag{7.4.23}$$

应当指出的是，在无噪声情况下，上述 Newton 方法的收敛区的大小和形状的精确估计仍然是个未解决的问题。

7.4.2 约束总体最小二乘与极大似然的关系

下面证明，约束总体最小二乘解可以根据约束的状态空间极大似然估计求得。令

$$C = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_L, \boldsymbol{b}]$$

并利用

$$\hat{\boldsymbol{A}}_i = \boldsymbol{a}_i + \boldsymbol{G}_i\boldsymbol{u}, \qquad i = 1, 2, \cdots, L \tag{7.4.24}$$

定义状态向量 $\hat{\boldsymbol{A}}_1, \hat{\boldsymbol{A}}_2, \cdots, \hat{\boldsymbol{A}}_L$。于是，根据 $(\boldsymbol{C} + [\boldsymbol{G}_1\boldsymbol{u}, \boldsymbol{G}_2\boldsymbol{u}, \cdots, \boldsymbol{G}_{L+1}\boldsymbol{u}])\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ -1\end{bmatrix} = \boldsymbol{0}$，解向量 $\boldsymbol{x}$ 满足方程

$$\hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b} = \boldsymbol{G}_{L+1}\boldsymbol{u} \tag{7.4.25}$$

其中

$$\hat{\boldsymbol{A}} = [\hat{\boldsymbol{A}}_1, \hat{\boldsymbol{A}}_2, \cdots, \hat{\boldsymbol{A}}_L]$$

现在，约束总体最小二乘问题可以重新叙述为

$$\min_{\boldsymbol{u}, \hat{\boldsymbol{A}}, \boldsymbol{x}} \|\boldsymbol{u}\|^2 \tag{7.4.26}$$

式中

$$\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{A}}_1 - \boldsymbol{a}_1\\ \vdots\\ \hat{\boldsymbol{A}}_L - \boldsymbol{a}_L\\ \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{G}_1\boldsymbol{u}\\ \vdots\\ \boldsymbol{G}_L\boldsymbol{u}\\ \boldsymbol{G}_{L+1}\boldsymbol{u}\end{bmatrix} = \bar{\boldsymbol{G}}\boldsymbol{u} \tag{7.4.27}$$

由此可以解出 $\boldsymbol{u}$ 为

$$\boldsymbol{u} = \bar{\boldsymbol{G}}^{\dagger}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{A}}_1 - \boldsymbol{a}_1\\ \vdots\\ \hat{\boldsymbol{A}}_L - \boldsymbol{a}_L\\ \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\end{bmatrix} \tag{7.4.28}$$

其中，$\bar{\boldsymbol{G}}^{\dagger} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ 是 $\bar{\boldsymbol{G}}$ 的伪逆矩阵。

令

$$\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2] \tag{7.4.29}$$

其中，$\boldsymbol{U}_1$ 是 $(L+1)M \times K$ 矩阵。于是，状态向量 $\hat{\boldsymbol{A}}_1, \hat{\boldsymbol{A}}_2, \cdots, \hat{\boldsymbol{A}}_L$ 和 $\boldsymbol{x}$ 满足约束条件

$$\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{A}}_1 - \boldsymbol{a}_1\\ \vdots\\ \hat{\boldsymbol{A}}_L - \boldsymbol{a}_L\\ \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\end{bmatrix} = \boldsymbol{0} \tag{7.4.30}$$

最后，约束总体最小二乘解可以叙述为：在式 (7.4.30) 所示约束条件下，

$$\min \left\|\bar{\boldsymbol{G}}^{\dagger}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{A}}_1 - \boldsymbol{a}_1\\ \vdots\\ \hat{\boldsymbol{A}}_L - \boldsymbol{a}_L\\ \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\end{bmatrix}\right\|^2 \tag{7.4.31}$$

下面再考查状态空间极大似然参数估计问题。考虑观测向量

$$\bar{c}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}_L\\ \boldsymbol{b}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_{10}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}_{L0}\\ \boldsymbol{A}_0\boldsymbol{x}\end{bmatrix}+\tilde{\boldsymbol{G}}\boldsymbol{v} \tag{7.4.32}$$

其中，$\boldsymbol{v}$ 是 K 维高斯白噪声向量。参数 $\boldsymbol{a}_{10},\boldsymbol{a}_{20},\cdots,\boldsymbol{a}_{L0}$ 是 M 维未知向量，$\boldsymbol{x}$ 是 L 维未知向量，而矩阵 $\boldsymbol{A}_0=[\boldsymbol{a}_{10},\boldsymbol{a}_{20},\cdots,\boldsymbol{a}_{L0}]$。

令

$$\boldsymbol{z}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v},\quad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\sigma_1 & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_K\\ 0 & \cdots & 0\\ \vdots & & \vdots\\ 0 & \cdots & 0\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}\\ \boldsymbol{0}\end{bmatrix},\quad \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}=\mathrm{diag}(\sigma_1,\cdots,\sigma_K)$$

用 $[\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2]^{\mathrm{H}}$ 左乘向量 $\bar{\boldsymbol{C}}$，则可以得到随机分量和确定性分量分别为

$$\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\bar{\boldsymbol{c}}=\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_{10}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}_{L0}\\ \boldsymbol{A}_0\boldsymbol{x}\end{bmatrix}+\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}\boldsymbol{z},\qquad \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\bar{\boldsymbol{c}}=\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_{10}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}_{L0}\\ \boldsymbol{A}_0\boldsymbol{x}\end{bmatrix} \tag{7.4.33}$$

对数似然函数变为

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_{10}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}_L-\boldsymbol{a}_{L0}\\ \boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{x}\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Sigma}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma})^{-1}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_{10}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}_L-\boldsymbol{a}_{L0}\\ \boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{x}\end{bmatrix} \tag{7.4.34}$$

约束条件为

$$\boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_{10}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}_L-\boldsymbol{a}_{L0}\\ \boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\boldsymbol{0} \tag{7.4.35}$$

注意到

$$\begin{aligned}(\tilde{\boldsymbol{G}}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{G}}^{\dagger}&=\boldsymbol{U}(\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}(\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}^{\dagger}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\\ &=[\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2]\begin{bmatrix}\sigma_1^{-1} & & 0\\ & \ddots & \\ 0 & & \sigma_K^{-1}\\ 0 & \cdots & 0\\ \vdots & & \vdots\\ 0 & \cdots & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\sigma_1^{-1} & & 0 & 0\\ & \ddots & & \vdots\\ 0 & & \sigma_K^{-1} & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\\ &=\boldsymbol{U}_1(\boldsymbol{\Sigma}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma})^{-1}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\end{aligned}$$

这意味着

$$\text{在 } \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{a}_1-\boldsymbol{a}_{10}\\ \vdots\\ \boldsymbol{a}_L-\boldsymbol{a}_{L0}\\ \boldsymbol{b}-\boldsymbol{A}_0\boldsymbol{x}\end{bmatrix}=\boldsymbol{0} \text{ 的约束条件下，} \quad \min\left\|\tilde{\boldsymbol{G}}^{\dagger}\begin{bmatrix}\hat{\boldsymbol{A}}_1-\boldsymbol{a}_1\\ \vdots\\ \hat{\boldsymbol{A}}_L-\boldsymbol{a}_L\\ \hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{b}\end{bmatrix}\right\|^2$$

与约束总体最小二乘的公式完全相同。换句话说，约束总体最小二乘解与约束极大似然估计等价。

7.4.3 约束总体最小二乘解的扰动分析

现在推导约束总体最小二乘解的小噪声扰动分析公式。当 $K\geqslant M$ 和 $\boldsymbol{W}_x$ 满行秩时，式 (7.4.11) 所示约束总体最小二乘解公式为

$$\min_{\boldsymbol{x}}\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ -1\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ -1\end{bmatrix}\right)$$

假定当矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的噪声为零时存在一致解

$$\boldsymbol{C}_0\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_0\\ -1\end{bmatrix}=\boldsymbol{0} \tag{7.4.36}$$

现在将一小噪声项加到 $\boldsymbol{C}_0$ 上，并计算在约束总体最小二乘解中引起的相应扰动。注意到函数

$$F(\boldsymbol{x})=\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ -1\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\ -1\end{bmatrix} \tag{7.4.37}$$

是复变量 $x_1,x_2,\cdots,x_L$ 的实的解析函数。因此，$F(\boldsymbol{x})$ 的极小化的必要条件是 [57]

$$\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{x}}=\left[\frac{\partial F}{\partial x_1},\frac{\partial F}{\partial x_2},\cdots,\frac{\partial F}{\partial x_L}\right]=\boldsymbol{0} \tag{7.4.38}$$

式中，$\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_L]$。根据第 1 章矩阵函数的偏导数公式，有

$$\frac{\partial F(\boldsymbol{x})^{-1}}{\partial x_i}=-\boldsymbol{F}(x)^{-1}\frac{\partial F(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}F(x)^{-1}$$

$$\frac{\partial F(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}y=\begin{bmatrix}\displaystyle\sum_{j=1}^{M}\frac{\partial F_{1j}(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}y_j\\ \vdots\\ \displaystyle\sum_{j=1}^{M}\frac{\partial F_{Mj}(\boldsymbol{x})}{\partial x_i}y_j\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\displaystyle\sum_{j=1}^{M}f_{1ji}y_j\\ \vdots\\ \displaystyle\sum_{j=1}^{M}f_{Mji}y_j\end{bmatrix}$$

和

$$\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{y}=\sum_{j=1}^{M}f_{njm}y_j,\qquad n=1,2,\cdots,M;\ m=1,2,\cdots,L+1$$

式中，$f_{njm}=\partial F_{nj}/\partial x_m$。

利用以上偏导数，可从式 (7.4.37) 得到

$$\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{x}} = -\begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x)^{-1} \frac{\partial \boldsymbol{W}_x}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{C} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix} \boldsymbol{C}^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{C} \boldsymbol{I}_{L+1,L} \tag{7.4.39}$$

令

$$\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{C} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix} \tag{7.4.40}$$

并注意到

$$\frac{\partial \boldsymbol{W}_x}{\partial \boldsymbol{x}} \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}} \boldsymbol{y} = [\boldsymbol{G}_1 \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}} \boldsymbol{y}, \cdots, \boldsymbol{G}_L \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}} \boldsymbol{y}, \boldsymbol{0}]$$

于是，$\dfrac{\partial F}{\partial \boldsymbol{x}}$ 可以写作

$$\frac{\partial F}{\partial \boldsymbol{x}} = -\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}} [\boldsymbol{G}_1 \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}} \boldsymbol{y}, \cdots, \boldsymbol{G}_L \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}} \boldsymbol{y}, \boldsymbol{0}] + \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{C} \boldsymbol{I}_{L+1,L} \tag{7.4.41}$$

在式 (7.4.40) 中，观察由小噪声扰动 $\Delta \boldsymbol{C}$ 引起的解向量 $\boldsymbol{x}$ 的扰动 $\Delta \boldsymbol{x}$。如果忽略 $\Delta \boldsymbol{x}$ 或 $\Delta \boldsymbol{C}$ 中的二阶和更高阶项，则

$$\begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{x} \\ 0 \end{bmatrix}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{C}_0^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{C}_0 \boldsymbol{I}_{L+1,L} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{H}} \Delta \boldsymbol{C}^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{C}_0 \boldsymbol{I}_{L+1,L} \approx \boldsymbol{0}$$

其共轭转置为

$$\boldsymbol{I}_{L+1,L} \boldsymbol{C}_0^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \left[\boldsymbol{C}_0 \begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{x} \\ 0 \end{bmatrix} + \Delta \boldsymbol{C} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ -1 \end{bmatrix} \right] = \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}$$

若定义

$$\boldsymbol{D} = \boldsymbol{I}_{L+1,L} \boldsymbol{C}_0^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} = \boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}$$

则有

$$\boldsymbol{D} \boldsymbol{C}_0 \begin{bmatrix} \Delta \boldsymbol{x} \\ 0 \end{bmatrix} + \boldsymbol{D} \Delta \boldsymbol{C} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ -1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{A}_0 \Delta \boldsymbol{x} + \boldsymbol{D} \Delta \boldsymbol{C} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ -1 \end{bmatrix} \approx \boldsymbol{0}$$

从而得到

$$\Delta \boldsymbol{x} = -[\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{A}_0]^{-1} \boldsymbol{D} \Delta \boldsymbol{C} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ -1 \end{bmatrix} \tag{7.4.42}$$

$\Delta \boldsymbol{x}$ 的协方差矩阵为

$$\mathrm{E}\{\Delta \boldsymbol{x} \Delta \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\} = [\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{A}_0]^{-1} \boldsymbol{D} \mathrm{E} \left\{ \Delta \boldsymbol{C} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{H}} \Delta \boldsymbol{C}^{\mathrm{H}} \right\} \times \boldsymbol{D}^{\mathrm{H}} [\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{A}_0]^{-1} \tag{7.4.43}$$

进而，由式 (7.4.10) 和式 (7.4.12) 得到

$$\Delta \boldsymbol{C} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_0 \\ -1 \end{bmatrix} = \boldsymbol{W}_x \boldsymbol{u}$$

故有

$$\mathrm{E}\left\{\Delta C\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_0\\-1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}_0\\-1\end{bmatrix}^{\mathrm{H}}\Delta C^{\mathrm{H}}\right\}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}\}=\boldsymbol{W}_x\mathrm{E}\{\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\}\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}$$
$$=\boldsymbol{W}_x\sigma^2\boldsymbol{I}\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}=\sigma^2\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}}$$

将上式代入式 (7.4.43)，最后得到

$$\mathrm{E}\{\Delta\boldsymbol{x}\Delta\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\}=\sigma^2[\boldsymbol{A}_0^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_x\boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{A}_0]^{-1} \tag{7.4.44}$$

这一公式对于在低信噪比情况下预测约束总体最小二乘估计子的精度是有用的。换句话说，式 (7.4.44) 给出了当 SNR $\to\infty$ 时约束总体最小二乘估计子的协方差。

7.4.4 应用

Abatzoglou 等人 [3] 以谐波信号的超分辨恢复为例，介绍了约束总体最小二乘的应用。假定有 L 个窄带波前信号照射到 N 个线性均匀阵列上。阵列信号满足下面的前向线性预测方程 [265]：

$$\boldsymbol{C}_k\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}=\boldsymbol{0},\qquad k=1,2,\cdots,M \tag{7.4.45}$$

其中

$$\boldsymbol{C}_k=\begin{bmatrix}y_k(1) & y_k(2) & \cdots & y_k(L+1)\\ y_k(2) & y_k(3) & \cdots & y_k(L+2)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ y_k(N-L) & y_k(N-L+1) & \cdots & y_k(N)\\ \hdashline y_k^*(L+1) & y_k^*(L) & \cdots & y_k^*(1)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ y_k^*(N) & y_k^*(N-1) & \cdots & y_k^*(N-L)\end{bmatrix} \tag{7.4.46}$$

这里，$y_k(i)$ 是第 k 个阵列在 i 时刻的输出观测值。矩阵 $\boldsymbol{C}_k$ 称为第 k 个快拍的数据矩阵。将所有的数据矩阵合成一个数据矩阵 $\boldsymbol{C}$，即

$$\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{C}_1\\ \boldsymbol{C}_2\\ \vdots\\ \boldsymbol{C}_M\end{bmatrix} \tag{7.4.47}$$

于是，超分辨谐波恢复问题归结为利用约束总体最小二乘求解矩阵方程，即

$$\boldsymbol{C}\begin{bmatrix}\boldsymbol{x}\\-1\end{bmatrix}=\boldsymbol{0}$$

而 $\boldsymbol{W}_x$ 的估计结果由下式给出：

$$\hat{\boldsymbol{W}}_x=\begin{bmatrix}\boldsymbol{W}_1 & 0\\ 0 & \boldsymbol{W}_2\end{bmatrix}$$

其中

$$W_1 = \begin{bmatrix} x_1 & x_2 & \cdots & x_L & -1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & x_1 & x_2 & \cdots & x_L & -1 \end{bmatrix}$$

$$W_2 = \begin{bmatrix} -1 & x_L & \cdots & x_2 & x_1 & & 0 \\ & \ddots & \ddots & & \ddots & \ddots & \\ 0 & & -1 & x_L & \cdots & x_2 & x_1 \end{bmatrix}$$

另外

$$\begin{aligned} F(\boldsymbol{x}) &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{C}^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{C} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix}^{\mathrm{H}} \sum_{m=1}^{M} \boldsymbol{C}_m^{\mathrm{H}} (\boldsymbol{W}_x \boldsymbol{W}_x^{\mathrm{H}})^{-1} \boldsymbol{C}_m \begin{bmatrix} \boldsymbol{x} \\ -1 \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{7.4.48}$$

为了估计相关的波数 ϕ_i，约束总体最小二乘方法分为三步：

(1) 利用 7.4.1 小节介绍的 Newton 方法求解式 (7.4.48)，得到 $\boldsymbol{x}$；

(2) 计算线性预测系数多项式

$$\sum_{k=1}^{L} x_k z^{k-1} - z^L = 0 \tag{7.4.49}$$

(3) 估计对应的角度 ϕ_i：

$$\phi_i = \arg(z_i), \qquad i = 1, 2, \cdots, L \tag{7.4.50}$$

7.4.5 正则化约束总体最小二乘图像恢复

退化图像的恢复是一个重要的问题，因为它能够从观测到的退化图像数据恢复丢失的信息。图像恢复的目的是在已知纪录数据和某些先验知识的情况下，求原始图像的最优解。

令 $N \times 1$ 点扩展函数 (point-spread function, PSF) 表示为

$$\boldsymbol{h} = \bar{\boldsymbol{h}} + \Delta \boldsymbol{h} \tag{7.4.51}$$

式中，$\bar{\boldsymbol{h}}, \Delta \boldsymbol{h} \in R^N$ 分别是点扩展函数的已知部分和 (未知的) 误差部分。误差分量 $\Delta \boldsymbol{h} = [\Delta h(0), \Delta h(1), \cdots, \Delta h(N-1)]^{\mathrm{T}}$ 为独立同分布噪声，均值为 0，方差为 σ_h。

观测到的退化图像用向量 $\boldsymbol{g}$ 表示，成像方程可用矩阵 - 向量形式表示为

$$\boldsymbol{g} = \boldsymbol{H}\boldsymbol{f} + \Delta \boldsymbol{g} \tag{7.4.52}$$

式中，$\boldsymbol{f}$ 和 $\Delta \boldsymbol{g} \in R^N$ 分别表示原始图像和观测图像的加性噪声。加性噪声 $\Delta \boldsymbol{g} = [\Delta g(0), \Delta g(1), \cdots, \Delta g(N-1)]^{\mathrm{T}}$ 也是独立同分布噪声，并与点扩展函数的误差分量 $\Delta \boldsymbol{h}$ 统计不相关。矩阵 $\boldsymbol{H} \in R^{N \times N}$ 表示点扩展矩阵，由已知部分 $\bar{\boldsymbol{H}}$ 和误差部分组成，即

$$\boldsymbol{H} = \bar{\boldsymbol{H}} + \Delta \boldsymbol{H} \tag{7.4.53}$$

式 (7.4.52) 的总体最小二乘解为

$$\boldsymbol{f}=\arg\min_{[\hat{\boldsymbol{H}},\hat{\boldsymbol{g}}]\in R^{N\times(N+1)}}\left\|[\boldsymbol{H},\boldsymbol{g}]-[\hat{\boldsymbol{H}},\hat{\boldsymbol{g}}]\right\|_F^2 \tag{7.4.54}$$

式中，$\hat{\boldsymbol{g}}$ 服从约束条件

$$\hat{\boldsymbol{g}}\in\operatorname{rank}(\hat{\boldsymbol{H}}) \tag{7.4.55}$$

通过定义未知的归一化噪声向量 $\boldsymbol{u}\in R^{2N}$ (由 $\Delta\boldsymbol{h}$ 和 $\Delta\boldsymbol{g}$ 组成)，即

$$\boldsymbol{u}=\left[\frac{\Delta h(0)}{\sigma_h},\cdots,\frac{\Delta h(N-1)}{\sigma_h},\frac{\Delta g(0)}{\sigma_g},\cdots,\frac{\Delta g(N-1)}{\sigma_g}\right]^{\mathrm{T}} \tag{7.4.56}$$

Mesarovic 等人 [310] 提出了基于约束总体最小二乘的图像恢复算法

$$\boldsymbol{f}=\arg\min_{\boldsymbol{f}}\left\{\|\boldsymbol{u}\|_2^2\right\} \tag{7.4.57}$$

约束条件为

$$\bar{\boldsymbol{H}}\boldsymbol{f}-\boldsymbol{g}+\boldsymbol{L}\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0} \tag{7.4.58}$$

式中，$\boldsymbol{L}$ 是一个 $N\times 2N$ 矩阵，定义为

$$\boldsymbol{L}=\left[\begin{array}{cccc:cccc}\sigma_h f(0) & \sigma_h f(N-1) & \cdots & \sigma_h f(1) & \sigma_g & 0 & \cdots & 0\\ \sigma_h f(1) & \sigma_h f(0) & \cdots & \sigma_h f(2) & 0 & \sigma_g & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ \sigma_h f(N-1) & \sigma_h f(N-2) & \cdots & \sigma_h f(0) & 0 & 0 & \cdots & \sigma_g\end{array}\right] \tag{7.4.59}$$

在给定被纪录的数据向量 $\boldsymbol{g}$ 和点扩展矩阵已知部分 $\bar{\boldsymbol{H}}$ 的情况下，式 (7.4.52) 的原始图像 $\boldsymbol{f}$ 的求解是一个典型的逆问题。因此，图像恢复问题的求解在数学上对应为式 (7.4.52) 的逆变换的存在性和唯一性。若逆变换不存在，则称图像恢复这一逆问题为奇异的。另一方面，逆变换虽然存在，但是其解有可能不唯一，而是有一组解。对一个实际的物理问题而言，这种非唯一解是不可接受的。此时，称图像恢复为病态的逆问题。这意味着，观测数据向量 $\boldsymbol{g}$ 中的小扰动有可能导致恢复图像 $\boldsymbol{g}$ 中的大扰动 [19],[443]。

克服图像恢复病态问题的有效方法之一是使用正则化 (regularization) 方法 [443],[124]，得到正则化约束总体最小二乘算法 [124],[163]。

正则化约束总体最小二乘图像恢复算法的基本思想是引入正则化算子 $\boldsymbol{Q}$ 和正则化参数 $\lambda>0$，将最小化的目标函数替换为两个互补函数之和，即式 (7.4.57) 变成

$$\boldsymbol{f}=\arg\min_{\boldsymbol{f}}\left\{\|\boldsymbol{u}\|_2^2+\lambda\|\boldsymbol{Q}\boldsymbol{f}\|_2^2\right\} \tag{7.4.60}$$

服从约束条件式 (7.4.58)。这种正则化约束总体最小二乘图像恢复算法是 Mesarovic 等人提出的 [310]。

正则化参数的选择需要兼顾观测数据的保真度和解的平滑性。为了进一步改善正则化约束总体最小二乘图像恢复算法的性能，Chen 等人 [84] 提出了自适应选择正则化参数 λ 的方法，并称之为自适应正则化约束总体最小二乘图像恢复算法。这一算法的解为

$$\boldsymbol{f}=\arg\min_{\boldsymbol{f}}\left\{\|\boldsymbol{u}\|_2^2+\lambda(\boldsymbol{f})\|\boldsymbol{Q}\boldsymbol{f}\|_2^2\right\} \tag{7.4.61}$$

服从约束条件式 (7.4.58)。

以上介绍了约束总体最小二乘在图像恢复中的应用原理。限于篇幅，对以上两种算法的实现，不再赘述，感兴趣的读者可分别参考文献 [310] 和文献 [84]。

综上所述，约束总体最小二乘中的扰动矩阵 $\Delta\boldsymbol{A}$ 约束为 $\Delta\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{G}_1\boldsymbol{u},\boldsymbol{G}_2\boldsymbol{u},\cdots,\boldsymbol{G}_n\boldsymbol{u}]$，而扰动向量 $\Delta\boldsymbol{b}$ 约束为 $\Delta\boldsymbol{b}=\boldsymbol{G}_{n+1}\boldsymbol{u}$。因此，约束总体最小二乘方法通过选择适当的矩阵 $\boldsymbol{G}_i(i=1,2,\cdots,n+1)$，使增广矩阵 $[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}]$ 的结构得到保持。

7.5 结构总体最小二乘

一个具有特殊结构的矩阵称为结构化矩阵 (structured matrix)。秩亏缺的结构化矩阵在信号处理、系统辨识和控制理论的许多应用中经常遇到。

令 $\boldsymbol{B}(b)=\boldsymbol{B}_0+b_1\boldsymbol{B}_1+\cdots+b_m\boldsymbol{B}_m\in R^{p\times q}$，其中，$p\geqslant q$，而 b_i 是参数向量 $\boldsymbol{b}\in R^m$ 的第 i 个分量，$\boldsymbol{B}_i$ $(i=1,2,\cdots,m)$ 为固定的已知矩阵。称 $\boldsymbol{B}(b)$ 是参数向量 $\boldsymbol{b}$ 的分量 b_i 的仿射矩阵函数。令 $\boldsymbol{a}\in R^m$ 为数据向量，$\boldsymbol{w}$ 是一给定的权系数向量。考虑下面的问题：在仿射集合 $\boldsymbol{B}(b)$ 中寻求一个秩亏缺的矩阵，使得参数 b_i 的一给定二次型函数 $[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{w}]_2^2$ 极小化。这就是所谓的结构总体最小二乘 (Structured Total Least Squares，STLS) 问题。它是由 De Moor[112],[114] 提出来的。从逼近的观点看，STLS 问题就是一个用类似结构的秩亏缺矩阵去逼近仿射结构化矩阵 (即参数仿射的矩阵)，并使 L_2 误差准则极小化的问题。因此，STLS 问题也可以看作是仿射结构化矩阵的总体最小二乘问题。

7.5.1 结构总体最小二乘解

下面详细考虑 STLS 问题的数学描述。暂时先不考虑权系数，取二次型准则

$$[\boldsymbol{a},\boldsymbol{b},\boldsymbol{w}]_2^2=\sum_{i=1}^{m}(a_i-b_i)^2 \tag{7.5.1}$$

下面的定理建立起了结构总体最小二乘与约束奇异值分解之间的关系。

定理 7.5.1[114] 考虑 STLS 问题

$$\min_{b\in R^m,\,y\in R^q}\sum_{i=1}^{m}(a_i-b_i)^2 \qquad \text{服从约束条件}\begin{cases}\boldsymbol{B}(b)\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0}\\ \boldsymbol{y}^{\mathrm T}\boldsymbol{y}=1\end{cases} \tag{7.5.2}$$

其中，a_i，$i=1,2,\cdots,m$ 是数据向量 $\boldsymbol{a}\in R^m$ 的元素；$\boldsymbol{B}(b)=\boldsymbol{B}_0+\boldsymbol{B}_1b_1+\cdots+\boldsymbol{B}_mb_m$，$\boldsymbol{B}_i\in R^{p\times q}(i=1,2,\cdots,m)$ 为固定的给定矩阵。STLS 问题的求解过程如下：

(1) 求对应于最小标量 τ 的三元组 $(\boldsymbol{u},\tau,\boldsymbol{v})$，其中，$\boldsymbol{u}\in R^p,\boldsymbol{v}\in R^q,\tau\in R$，使得

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}=\tau\boldsymbol{D}_v\boldsymbol{u},\qquad \boldsymbol{u}^{\mathrm T}\boldsymbol{D}_v\boldsymbol{u}=1 \tag{7.5.3}$$

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm T}\boldsymbol{u}=\tau\boldsymbol{D}_u\boldsymbol{v},\qquad \boldsymbol{v}^{\mathrm T}\boldsymbol{D}_u\boldsymbol{v}=1 \tag{7.5.4}$$

式中，$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}_0+\sum_{i=1}^{m}a_i\boldsymbol{B}_i$；而 $\boldsymbol{D}_u$ 定义为

$$\sum_{i=1}^{m}\boldsymbol{B}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{v})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{D}_u\boldsymbol{v}$$

它是一个对称的正定或非负定矩阵，其元素是 $\boldsymbol{u}$ 的元素的二次型。类似地，$\boldsymbol{D}_v$ 定义为

$$\sum_{i=1}^{m}\boldsymbol{B}_i^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_i\boldsymbol{v})\boldsymbol{v}=\boldsymbol{D}_v\boldsymbol{u}$$

它是一个对称的正定或非负定矩阵，其元素是 $\boldsymbol{v}$ 的元素的二次型。

(2) 利用 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{v}/\|\boldsymbol{v}\|$ 构造向量 $\boldsymbol{y}$。

(3) 计算 $\boldsymbol{b}$ 的元素

$$b_k=a_k-\tau\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_k\boldsymbol{v},\qquad k=1,2,\cdots,m \tag{7.5.5}$$

证明 参见文献 [114]。

如果 $\boldsymbol{D}_u$ 和 $\boldsymbol{D}_v$ 是正定或非负定的常数矩阵 (即与 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 独立)，则对于某个给定的矩阵 $\boldsymbol{A}$，定理 7.5.1 中的方程会被矩阵三元组 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{D}_v^{1/2},\boldsymbol{D}_u^{1/2})$ 的任一约束奇异值分解结果 $(\boldsymbol{u},\tau,\boldsymbol{v})$ 所满足，其中，$\boldsymbol{D}_v^{1/2}$ 和 $\boldsymbol{D}_u^{1/2}$ 分别是 $\boldsymbol{D}_v$ 和 $\boldsymbol{D}_u$ 的平方根。在 $\boldsymbol{D}_u$ 和 $\boldsymbol{D}_v$ 为常数矩阵的假设下，式 (7.5.4) 是一广义特征值问题。然而，"非线性" 表现在：权系数矩阵 $\boldsymbol{D}_u$ 和 $\boldsymbol{D}_v$ 与 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的元素是明显相关的。正如后面将看到的那样，这些矩阵总是非负定的 (因此，对应于 "正相关" 的内积)，而且它们的元素是 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的分量的二次型。

定理 7.5.1 给出的结构总体最小二乘解具有以下性质 [114]。

(1) 正交性 残差向量 $\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b}$ 与解向量 $\boldsymbol{b}$ 正交，即 $(\boldsymbol{a}-\boldsymbol{b})\perp\boldsymbol{b}$。

(2) 等价性 若矩阵 $\boldsymbol{D}_y$ 或等价地 $\boldsymbol{D}_v$ 可逆，则约束总体最小二乘解等价于

$$\text{在条件 } \boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_u\boldsymbol{v}=1 \text{ 的约束下，}\quad \text{最小化 } J(\tau)=\tau^2=\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_v^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} \tag{7.5.6}$$

(3) 尺度不变性 目标函数 $J(\tau)$ 具有尺度不变性，即若用 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{v}/\alpha$ 代替 $\boldsymbol{v}$，则

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_v^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}=\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_w^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{w}$$

(4) 规范性 若 $\boldsymbol{D}_u$ 和 $\boldsymbol{D}_v$ 如定理 7.5.1 定义，则对任意向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 恒有 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_v\boldsymbol{u}=\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_u\boldsymbol{v}$。

(5) 非唯一性 向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 的方向是唯一确定的，但它们的范数或者长度是非唯一的，即属于式 (7.5.4) 中相同 τ 值的向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 不是唯一的。

7.5.2 逆迭代算法

式 (7.5.4) 称为 Riemannian 奇异值分解，可以利用逆迭代算法求解 [114]。

假定 $\boldsymbol{D}_u$ 和 $\boldsymbol{D}_v$ 是与 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 独立的常数矩阵，最小特征值可以利用逆迭代求出。所

谓逆迭代，就是对于已给定的矩阵 $\boldsymbol{D}_u$ 和 $\boldsymbol{D}_v$，执行一步逆迭代，利用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解求 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 新的估计；这些估计又用来更新 $\boldsymbol{D}_u$ 和 $\boldsymbol{D}_v$。下面用方括号表示迭代步数，如 $\boldsymbol{u}^{[0]}$ 表示 $\boldsymbol{u}$ 的初始值，而 $\boldsymbol{u}^{[k]}$ 代表第 k 步迭代的 $\boldsymbol{u}$ 值，等等。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解记作

$$\boldsymbol{A}=[\underbrace{\boldsymbol{Q}_1}_{p\times q},\ \underbrace{\boldsymbol{Q}_2}_{p\times(p-q)}]\begin{bmatrix}\underbrace{\boldsymbol{R}}_{q\times q}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix} \tag{7.5.7}$$

并将 $\boldsymbol{u}$ 分解为 $\boldsymbol{u}=\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{z}+\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{w}$，其中，$\boldsymbol{z}\in R^q$，$\boldsymbol{w}\in R^{p-q}$。由式 (7.5.4) 易得

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}} & 0 & 0\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_v\boldsymbol{Q}_1 & \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_v\boldsymbol{Q}_2 & 0\\ \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_v\boldsymbol{Q}_1\tau & \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_v\boldsymbol{Q}_2\tau & -\boldsymbol{R}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{z}\\ \boldsymbol{w}\\ \boldsymbol{v}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{D}_u\boldsymbol{v}\tau\\ 0\\ 0\end{bmatrix} \tag{7.5.8}$$

这个方程组有 $(p+q)$ 个方程和 $(p+q)$ 个未知数。

算法 7.5.1 (逆迭代算法) [114]

步骤 1 初始化

选择 $\boldsymbol{u}^{[0]}$ 和 $\tau^{[0]}$，构造 $\boldsymbol{D}_{u^{[0]}},\boldsymbol{D}_{v^{[0]}}$，并进行归一化，以使得

$$(\boldsymbol{v}^{[0]})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{u^{[0]}}\boldsymbol{v}^{[0]}=(\boldsymbol{u}^{[0]})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{v^{[0]}}\boldsymbol{u}^{[0]}=1 \tag{7.5.9}$$

步骤 2 令 $k=1$，计算

(1) $\boldsymbol{z}^{[k]}=\boldsymbol{R}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{u^{[k-1]}}\boldsymbol{v}^{[k-1]}\tau^{[k-1]}$

(2) $\boldsymbol{w}^{[k-1]}=-(\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{v^{[k-1]}}\boldsymbol{Q}_2)^{-1}(\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{v^{[k-1]}}\boldsymbol{Q}_1)\boldsymbol{z}^{[k]}$

(3) $\boldsymbol{u}^{[k]}=\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{z}^{[k]}+\boldsymbol{Q}_2\boldsymbol{w}^{[k]}$

(4) $\boldsymbol{v}^{[k]}=\boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{v^{[k-1]}}\boldsymbol{u}^{[k]}$

(5) $\boldsymbol{v}^{[k]}=\boldsymbol{v}^{[k]}/\|\boldsymbol{v}^{[k]}\|$

(6) $\gamma^{[k]}=\sqrt[4]{(\boldsymbol{u}^{[k]})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{v^{[k]}}\boldsymbol{u}^{[k]}}$

(7) $\boldsymbol{u}^{[k]}=\boldsymbol{u}^{[k]}/\gamma^{[k]}$; $\boldsymbol{v}^{[k]}=\boldsymbol{v}^{[k]}/\gamma^{[k]}$

(8) $\boldsymbol{D}_{u^{[k]}}=\boldsymbol{D}_{u^{[k]}}/(\gamma^{[k]})^2$; $\boldsymbol{D}_{v^{[k]}}=\boldsymbol{D}_{v^{[k]}}/(\gamma^{[k]})^2$

(9) $\tau^{[k]}=(\boldsymbol{u}^{[k]})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}^{[k]}$

步骤 3 收敛试验：利用式 (7.5.5) 计算 $\boldsymbol{B}^{[k]}$ 和它的最大奇异值 $\beta_1^{[k]}$ 及最小奇异值 $\beta_q^{[k]}$。如果 $\beta_q^{[k]}/\beta_1^{[k]}\geqslant\epsilon_m$，则 $k\leftarrow k+1$，并重复 (1) ~ (9) 的计算。否则，停止迭代过程。

一步迭代相当于利用 QR 分解求解具有常数矩阵 $\boldsymbol{D}_u$ 和 $\boldsymbol{D}_v$ 的线性方程组 (7.5.8)。

步骤 2 中 (5) 的归一化是必要的。没有它，算法会变得不稳定：当 $k\to\infty$ 时会有 $\|\boldsymbol{v}^{[k]}\|\to 0$ 和 $\|\boldsymbol{u}^{[k]}\|\to\infty$，而 $\|\boldsymbol{u}^{[k]}\|\|\boldsymbol{v}^{[k]}\|$ 却保持为一常数。因此，有必要在中间步骤通过归一化 $\boldsymbol{v}$ 向量使算法“规范化”。这是完全可能的，因为前一小节的性质 (5) 可以保证这一点。

初始猜测的自然选择是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对应于其最小奇异值 $\tau_{\min}$ 的奇异三元组 $(\boldsymbol{u},\tau_{\min},\boldsymbol{v})$。如果矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是非结构化的，该三元组将提供最终的解。然而，这一选择并不能保证收敛为全局极小值。根据性质 4，向量 $\boldsymbol{u}^{[0]}$ 和 $\boldsymbol{v}^{[0]}$ 的初始归一化是很自然的选择。

应当指出，上述算法还远不是有效的。例如，若 p 比 q 大得多，则 $(p-q)\times(p-q)$ 矩阵 $(\boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_v\boldsymbol{Q}_2)$ 的求逆需要很大的计算量。另外，算法还需要一个精确的收敛准则。最后，算法的收敛性也是一个有待证明的问题。

7.5.3 约束总体最小二乘与结构总体最小二乘的等价性

将总体最小二乘、约束总体最小二乘和结构总体最小二乘进行比较，有助于我们进一步理解它们之间的联系与区别。

令 $\boldsymbol{A}$ 是 $m\times n$ 矩阵，且 $\boldsymbol{b}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 分别为 $m\times 1$ 和 $n\times 1$ 向量。求解超定方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的总体最小二乘方法，其本质是求解约束优化问题

$$\min_{\Delta\boldsymbol{A},\Delta\boldsymbol{b}}\|[\Delta\boldsymbol{A},\Delta\boldsymbol{b}]\|_{\mathrm{F}},\quad 使得\ \boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}\in\mathrm{Range}(\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A})\tag{7.5.10}$$

求解总体最小二乘问题的标准方法是对增广矩阵 $[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}]$ 进行奇异值分解。但是，奇异值分解不能保持增广矩阵 $[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}]$ 的结构。因此，如果增广矩阵为结构化矩阵 (例如它是 Hankel 矩阵、Toeplitz 矩阵或稀疏矩阵等)，总体最小二乘方法将得不到统计最优的参数向量 $\boldsymbol{x}$。

与总体最小二乘不同，约束总体最小二乘求解下列约束优化问题：

$$\min_{\boldsymbol{u},\boldsymbol{x}}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{u},\quad 使得\ (\boldsymbol{A}+\Delta\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{b}+\Delta\boldsymbol{b}\tag{7.5.11}$$

式中，$\boldsymbol{W}$ 为对角加权矩阵，扰动矩阵 $\Delta\boldsymbol{A}$ 约束为 $\Delta\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{G}_1\boldsymbol{u},\boldsymbol{G}_2\boldsymbol{u},\cdots,\boldsymbol{G}_n\boldsymbol{u}]$，而扰动向量 $\Delta\boldsymbol{b}$ 约束为 $\Delta\boldsymbol{b}=\boldsymbol{G}_{n+1}\boldsymbol{u}$。在这种方法里，增广矩阵 $[\boldsymbol{A},\boldsymbol{b}]$ 的结构可以通过选择适当的矩阵 $\boldsymbol{G}_i(i=1,2,\cdots,n+1)$ 得到保持。

利用 Lagrange 乘数法，可以将约束优化问题 (7.5.11) 变为无约束优化问题 [1]

$$\min_{\boldsymbol{x}}[\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}},-1]\boldsymbol{S}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{H}_x\boldsymbol{W}^{-1}\boldsymbol{H}_x^{\mathrm{T}})^{-1}\boldsymbol{S}[\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}},-1]^{\mathrm{T}}\tag{7.5.12}$$

式中，$\boldsymbol{H}_x=\sum_{i=1}^{n}x_i\boldsymbol{G}_i-\boldsymbol{G}_{n+1}$。

在结构总体最小二乘方法中，通过选择合适的固定矩阵 $\boldsymbol{S}_i$，可以保持约束总体最小二乘问题 (7.5.12) 中矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的结构，即令

$$\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S}_0+\sum_{i=1}^{k}s(i)\boldsymbol{S}_i\tag{7.5.13}$$

结构总体最小二乘方法将超定方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 变为 $\boldsymbol{Ty}=\boldsymbol{0}$ 的形式，并且对矩阵 $\boldsymbol{T}$ 加结构约束：

$$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{S}_0+\sum_{i=1}^{k}t(i)\boldsymbol{S}_i\tag{7.5.14}$$

于是，求解 $\boldsymbol{Ty}=\boldsymbol{0}$ 的结构总体最小二乘方法便变成了约束优化问题：

$$\min_{\boldsymbol{t},\boldsymbol{y}}\sum_{i=1}^{k}W(i,i)[s(i)-t(i)]^2,\quad 使得\ \boldsymbol{Ty}=\boldsymbol{0},\quad \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=1\tag{7.5.15}$$

式中，$\boldsymbol{t} = [t(1), t(2), \cdots, t(k)]^{\mathrm{T}}$，并且 $W(i,i)$ 是对角加权矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的对角元素。

观察知，矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的结构被强迫与 $\boldsymbol{S}$ 的结构相同。

下面的命题表明，约束总体最小二乘与结构总体最小二乘两种方法得到的解等价。

命题 7.5.1 令 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{opt}}$ 是约束总体最小二乘方法的约束优化问题式 (7.5.12) 的解向量，且 $\boldsymbol{y}_{\mathrm{opt}}$ 是结构总体最小二乘方法无归一化约束 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = 1$ 的约束优化问题式 (7.5.15) 的解向量。若 $\boldsymbol{y}_{\mathrm{opt}}(n+1) \neq 0$，并且矩阵

$$\boldsymbol{D}_y \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{i=1}^{k} \frac{1}{W(i,i)} (\boldsymbol{S}_i \boldsymbol{y})(\boldsymbol{S}_i \boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}$$

非奇异，则可以求出一解向量 $\boldsymbol{y}_{\mathrm{opt}}$ 满足 $\boldsymbol{x}_{\mathrm{opt}} = \boldsymbol{y}_{\mathrm{opt}}(1:n)$ 和 $y_{\mathrm{opt}}(n+1) = -1$，这表明约束总体最小二乘方法与结构总体最小二乘方法等价。其中，$\boldsymbol{y}_{\mathrm{opt}}(1:n)$ 表示由 $(n+1)\times 1$ 解向量 $\boldsymbol{y}_{\mathrm{opt}}$ 前 n 个元素组成的向量，而 $y_{\mathrm{opt}}(n+1)$ 表示 $\boldsymbol{y}_{\mathrm{opt}}$ 的第 $(n+1)$ 个元素。

证明 见文献 [277]。

7.5.4 秩亏缺 Hankel 矩阵逼近

在第 6 章我们已看到，对一个已知矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最佳的秩亏缺最小二乘逼近可以利用 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解得到。当 $\boldsymbol{A}$ 没有任何特殊结构时，结构总体最小二乘解式 (7.5.4) 中的矩阵 $\boldsymbol{D}_u$ 和 $\boldsymbol{D}_v$ 简化为单位矩阵，方程也简化为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v} = \tau\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u} = \tau\boldsymbol{v}$，其中，$\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v} = 1$，$\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u} = 1$，它恰好就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的普通奇异值分解。

现在假定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有某种特殊结构，即它是结构化的。秩亏缺逼近的一般做法是，将 $\boldsymbol{A}$ 的并向量分解截尾到 $q-1$ 项。但是，这样一来，逼近矩阵将不再具有所要求的结构，甚至于没有了任何结构。于是，我们就会试图对得到的秩亏缺矩阵求最佳最小二乘拟合，它具有所要求的结构。例如，对于 Hankel 矩阵，交叉对角线上的所有元素用它们的平均值代替后，就得到了一新的矩阵。然而，这种新的矩阵虽然是 Hankel 结构的，但不再是秩亏缺的。因此，我们需要再次使用奇异值分解求新矩阵的秩亏缺逼近，如此反复。这样一种方法是 Cadzow [71] 提出的，其具体算法如下。

算法 7.5.2 (Cadzow 算法)

步骤 1 初始化

$\boldsymbol{B}^{[0]} = \boldsymbol{A}$

步骤 2 令 $k=1$，并进行如下运算：

(1) 略去并向量分解式 (6.2.13) 中与最小奇异值对应的并向量，对 $\boldsymbol{B}^{[k-1]}$ 的奇异值分解进行截尾。令所得到的秩亏缺矩阵为 $\boldsymbol{C}^{[k]}$ (它将没有 Hankel 结构)。

(2) 对 $\boldsymbol{C}^{[k]}$ 作最佳最小二乘拟合，得到 $\boldsymbol{B}^{[k]}$，它具有 Hankel 结构 (它将不是秩亏缺的)。

(3) 收敛试验：令 $\beta_1^{[k]}$ 和 $\beta_q^{[k]}$ 是 $\boldsymbol{B}^{[k]}$ 的最大和最小奇异值，验证 $\beta_q^{[k]}/\beta_1^{[k]} \leqslant \epsilon$ 是否满足？若满足，则停止；否则令 $k=k+1$，返回步骤 2 的 (1)，并重复以上运算，直至收敛。

下面，将秩亏缺 Hankel 矩阵逼近问题与有噪声的实现问题联系起来考虑。

考虑用向量 $\boldsymbol{b}=[b_1,b_2,\cdots,b_{p+q-1}]^{\mathrm{T}}\in R^{p+q-1}$ 逼近一数据向量 $\boldsymbol{a}\in R^{p+q-1}$ 的问题，我们的目标是使逼近残差的平方和有条件地极小化 (即约束极小化)：

$$\min\sum_{i=1}^{p+q-1}(a_i-b_i)^2,\quad 约束条件为\ \boldsymbol{By}=\boldsymbol{0},\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=1 \tag{7.5.16}$$

其中，$\boldsymbol{B}$ 是一个由 $\boldsymbol{b}$ 的元素构造的 Hankel 矩阵。Hankel 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是秩亏缺的，这就保证了 $\boldsymbol{b}$ 是有限维 (其阶数最高为 $q-1$) 线性系统的冲激响应。因此，Hankel 矩阵的列数 q (它可以自由选择) 将定义逼近系统的最高阶数为 $q-1$ 阶。这样一来，表征逼近序列 $b=\{b_1,b_2,\cdots,b_{p+q-1}\}$ 数学模型的系统特征多项式就可以用

$$y(z)=y_qz^{q-1}+\cdots+y_2z+y_1 \tag{7.5.17}$$

表示。这意味着，序列 b 的 Z 变换具有形式 $b(z)=t(z)/y(z)$，其中，$t(z)$ 是一个低于 q 次的多项式。如果向量 $\boldsymbol{a}$ 本身是一个高维系统的冲激响应向量，那么这就是一个模型简化问题。对于 $p\to\infty$ 的情况，问题即成了 H_2 模型简化问题 [113]。

7.5.5 有噪声的实现问题

现在考虑序列 $a_1,a_2,\cdots,a_{p+q-1}$ 为一给定的数据序列 (它不是冲激响应，而是一个被噪声污染的数据序列) 的情况。通常，称这种情况下的逼近问题为有噪声的实现问题 (noisy realization problem)。

有噪声的实现问题的 Lagrangean 函数为

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{b},\boldsymbol{y},\boldsymbol{l})=\sum_{i=1}^{p+q-1}(a_i-b_i)^2+\boldsymbol{l}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{By}+\lambda(\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}-1)$$

其中，$\boldsymbol{B}$ 为 Hankel 矩阵。令所有导数为零，即可得到方程组

$$\begin{aligned}a_1-b_1&=l_1y_1\\ a_2-b_2&=l_1y_2+l_2y_1\\ a_3-b_3&=l_1y_3+l_2y_2+l_3y_1\\ &\cdots\\ a_{p+q-1}-b_{p+q-1}&=l_py_q\end{aligned}$$

以及

$$\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{l}=\boldsymbol{y}\lambda,\qquad \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=1,\qquad \boldsymbol{By}=\boldsymbol{0}$$

注意，共有 $(2p+2q)$ 个未知数 (向量 $\boldsymbol{b},\boldsymbol{l},\boldsymbol{y}$ 的元素和 λ) 和 $(2p+2q)$ 个方程。直接运算可

求得 $\lambda=0$，因为 $\boldsymbol{l}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{y}=\lambda=0$。令 $\boldsymbol{B}$ 是一个由 $\boldsymbol{b}$ 的元素构造的 $p\times q$ Hankel 矩阵，则

$$\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}=\begin{bmatrix} l_1 & \cdots & \cdots & \cdots & l_p & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ l_2 & \cdots & \cdots & l_p & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & l_1 \\ l_3 & \cdots & l_p & 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & l_1 & l_2 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & \vdots \\ l_p & \cdots & 0 & 0 & l_1 & 0 & \cdots & l_{p-3} & l_{p-2} & l_{p-1} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 & y_2 & \cdots & y_q \\ 0 & y_1 & \cdots & y_{q-1} \\ 0 & 0 & \cdots & y_{q-2} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & y_1 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_q & 0 & \cdots & 0 \\ y_{q-1} & y_q & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ y_2 & y_3 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \tag{7.5.18}$$

这表明，差 $\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}$ 是一个 Hankel 矩阵与一个 Toeplitz 矩阵 (注意两个矩阵的"循环"结构) 之乘积。式 (7.5.18) 的分解有一个有用性质。为了看清楚这一点，下面以 $p=4,q=3$ 为例。用向量 $\boldsymbol{z}$ 右乘式 (7.5.18)，则有

$$\begin{aligned} &\begin{bmatrix} l_1 & l_2 & l_3 & l_4 & 0 & 0 \\ l_2 & l_3 & l_4 & 0 & 0 & l_1 \\ l_3 & l_4 & 0 & 0 & l_1 & l_2 \\ l_4 & 0 & 0 & l_1 & l_2 & l_3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 & y_2 & y_3 \\ 0 & y_1 & y_2 \\ 0 & 0 & y_1 \\ 0 & 0 & 0 \\ y_3 & 0 & 0 \\ y_2 & y_3 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{bmatrix} \\ &=\begin{bmatrix} z_1 & z_2 & z_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & z_1 & z_2 & z_3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & z_1 & z_2 & z_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & z_1 & z_2 & z_3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} y_1 & 0 & 0 & 0 \\ y_2 & y_1 & 0 & 0 \\ y_3 & y_2 & y_1 & 0 \\ 0 & y_3 & y_2 & y_1 \\ 0 & 0 & y_3 & y_2 \\ 0 & 0 & 0 & y_3 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} l_1 \\ l_2 \\ l_3 \\ l_4 \end{bmatrix} \\ &=\boldsymbol{H}_z\boldsymbol{H}_y^{\mathrm{T}}\boldsymbol{l} \end{aligned} \tag{7.5.19}$$

式中，$\boldsymbol{H}_z$ 和 $\boldsymbol{H}_y$ 是具有 $\boldsymbol{z}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 的元素的有界矩阵。这就证明了，Hankel-Toeplitz 向量乘积转换成了 Toeplitz-Toeplitz 向量乘积。

利用上述性质可消去矩阵 $\boldsymbol{B}$。为此，用 $\boldsymbol{y}$ 右乘 $\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}$ 得到 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{D}_y\boldsymbol{l}$，其中，$\boldsymbol{D}_y$ 是一个 $p\times p$ 的有界对称正定矩阵，形如 $\boldsymbol{D}_y=\boldsymbol{T}_y\boldsymbol{T}_y^{\mathrm{T}}$。因此，矩阵 $\boldsymbol{D}_y$ 的元素是 $\boldsymbol{y}$ 的分量的二次型函数。类似地，用 $\boldsymbol{l}$ 右乘 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$ 得到 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{l}=\boldsymbol{D}_l\boldsymbol{y}$，其中，$\boldsymbol{D}_l$ 是 $q\times q$ 对称的正定 Toeplitz 矩阵，即 $\boldsymbol{D}_l=\boldsymbol{H}_l\boldsymbol{H}_l^{\mathrm{T}}$。如果将 $\boldsymbol{l}$ 规范化使得 $l/\|\boldsymbol{l}\|=\boldsymbol{x}$ 和 $\|\boldsymbol{l}\|=\sigma$，则可得到

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{A}\boldsymbol{y}=\sigma\boldsymbol{D}_y\boldsymbol{x}, \qquad \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=1 \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=\sigma\boldsymbol{D}_x\boldsymbol{y}, \qquad \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=1 \end{aligned}\right\} \tag{7.5.20}$$

可以证明 [114]，上式与式 (7.5.4) 等价。

下面考虑加权的秩亏缺 Hankel 逼近。加权误差准则定义为

$$\text{在条件}\begin{cases} \boldsymbol{B}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=1 \end{cases}\quad\text{约束下，}\quad\text{极小化}\ \sum_{i=1}^{p+q-1}(a_i-b_i)^2 w_i$$

其中，$\boldsymbol{B}$ 是 Hankel 矩阵，且 $w_i \in R_0^+$ 为正的权系数。令 $\boldsymbol{W} = \text{diag}(w_1, w_2, \cdots, w_{p+q-1})$，则结构总体最小二乘解可以根据定理 7.5.1，利用广义奇异值分解问题 (7.5.4) 式得到，其中

$$\boldsymbol{D}_u = \boldsymbol{H}_u \boldsymbol{W}^{-1} \boldsymbol{H}_u^{\mathrm{T}}, \qquad \boldsymbol{D}_v = \boldsymbol{H}_v \boldsymbol{W}^{-1} \boldsymbol{H}_v^{\mathrm{T}}$$

正交性现在变成

$$(\boldsymbol{a} - \boldsymbol{b})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{W} \boldsymbol{b} = 0$$

文献 [59] 和文献 [97] 讨论了式 (7.5.6) 的极小化问题，并采用了关于 $\boldsymbol{v}$ 的线性约束，如要求其分量之一等于 1，即

$$v_q = 1$$

然后，使用一种迭代二次型极大似然 (iterative quadratic maximum likelihood，IQML) 方法，并在每一步迭代中，以式 (7.5.5) 作为线性约束条件，使二次型 (7.5.6) 极小化，其中，$\boldsymbol{D}_v$ 假定不改变。下面是文献 [59] 的基本算法。

定义 $\boldsymbol{C}^{[k-1]} \in R^{(q-1)\times(q-1)}, \boldsymbol{c}^{[k-1]} \in R^q$ 和 $\gamma^{[k-1]} \in R$ 满足关系式

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{C}^{[k-1]} & \boldsymbol{c}^{[k-1]} \\ (\boldsymbol{c}^{[k-1]})^{\mathrm{T}} & \gamma^{[k-1]} \end{bmatrix} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D}_{v^{[k-1]}}^{-1} \boldsymbol{A}$$

将 $\boldsymbol{v}^{[k]}$ 分块为

$$\boldsymbol{v}^{[k]} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}^{[k]} \\ 1 \end{bmatrix}$$

于是，在式 (7.5.5) 条件约束下，式 (7.5.6) 的极小化结果是

$$\boldsymbol{w}^{[k]} = -(\boldsymbol{C}^{[k-1]})^{-1} \boldsymbol{c}^{[k-1]}$$

和

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D}_{v^{[k-1]}}^{-1} \boldsymbol{A}) \boldsymbol{v}^{[k]} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{C}^{[k-1]} & \boldsymbol{c}^{[k-1]} \\ (\boldsymbol{c}^{[k-1]})^{\mathrm{T}} & \gamma^{[k-1]} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}^{[k]} \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 \\ \gamma^{[k-1]} - (\boldsymbol{c}^{[k-1]})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{C}^{[k-1]} \boldsymbol{c}^{[k-1]} \end{bmatrix}\end{aligned}$$

如果算法收敛，则上述算法对 $\boldsymbol{v}^{[\infty]}, \boldsymbol{C}^{[\infty]}, \boldsymbol{c}^{[\infty]}, \gamma^{[\infty]}$ 也满足，即有

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D}_{v^{[\infty]}}^{-1} \boldsymbol{A}) \boldsymbol{v}^{[\infty]} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{C}^{[\infty]} & \boldsymbol{c}^{[\infty]} \\ (\boldsymbol{c}^{[\infty]})^{\mathrm{T}} & \gamma^{[\infty]} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{w}^{[\infty]} \\ 1 \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 \\ \gamma^{[\infty]} - (\boldsymbol{c}^{[\infty]})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{C}^{[\infty]} \boldsymbol{c}^{[\infty]} \end{bmatrix}\end{aligned} \tag{7.5.21}$$

另外一种方法是用二次型条件

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v} = 1 \tag{7.5.22}$$

代替线性约束条件式 (7.5.5)。如果在每一步仍然假定 $\boldsymbol{D}_v$ 不变，那么在式 (7.5.22) 的约束下，式 (7.5.6) 的极小化就需要计算最小特征值 $\lambda^{[k]}$ 和与之对应的特征向量 $\boldsymbol{v}^{[k]}$，二者将满足

$$(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{D}_{v^{[k-1]}}^{-1} \boldsymbol{A}) \boldsymbol{v}^{[k]} = \boldsymbol{v}^{[k]} \lambda^{[k]}, \qquad (\boldsymbol{v}^{[k]})^{\mathrm{T}} \boldsymbol{v}^{[k]} = 1$$

上式一旦收敛，则有

$$(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_{v^{[\infty]}}^{-1}\boldsymbol{A})\boldsymbol{v}^{[\infty]}=\boldsymbol{v}^{[\infty]}\lambda^{[\infty]},\qquad(\boldsymbol{v}^{[\infty]})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}^{[\infty]}=1\tag{7.5.23}$$

Steiglitz-McBride 算法是计算一已知数据序列的有理式逼近的一种迭代方法。这种方法原本是一种基于输入输出测量的系统辨识技术，但也适用于有噪声的冲激响应实现问题。令模型如式 (7.5.17) 所示。在第 k 次迭代，估计 $t^{[k]}(z)$ 和 $y^{[k]}(t)$ 是利用误差准则

$$e^{[k]}=\sum_{i=1}^{p+q-1}\left[y^{[k]}(z)\left(\frac{1}{y^{[k-1]}(z)}[a(t)]\right)-t^{[k]}(z)\left(\frac{1}{y^{[k-1]}(z)}[\delta(t)]\right)\right]^2$$

的极小化求解。典型地，可以加一个诸如 $y_q^{[k]}=1$ 的约束，以避免平凡的零解。误差方程也可以转换成矩阵一向量形式

$$e^{[k]}=\left\|\boldsymbol{C}^{[k-1]}\boldsymbol{y}^{[k]}-\boldsymbol{H}^{[k-1]}\boldsymbol{t}^{[k]}\right\|_2^2\tag{7.5.24}$$

其中，$\boldsymbol{C}^{[k-1]}$ 和 $\boldsymbol{H}^{[k-1]}$ 是下三角 Toeplitz 矩阵，它们由数据序列 $a(k)$ 和全极点滤波器 $\dfrac{1}{y^{[k-1]}(z)}$ 的冲激响应组成，详见文献 [307]。

很明显，式 (7.5.24) 在关于 $\boldsymbol{y}^{[k]}$ 的线性约束条件下的极小化是一个最小二乘问题。业已证明 [307]，在每一步迭代过程中，此问题的解与具有线性约束的迭代二次型极大似然法给出的解完全相同。因此，当应用于有噪声的实现问题时，Steiglitz-McBride 算法与线性约束的迭代二次型极大似然法是一致的。

上述秩亏缺 Hankel 矩阵逼近和有噪声的实现问题说明，Moor 为仿射结构化矩阵提出的结构总体最小二乘方法 [114] 在信号处理和系统理论中具有重要的应用。

除了前面介绍的几种总体最小二乘方法外，Roorda 与 Hejj 于 1995 年提出了动态系统建模的全局总体最小二乘方法 [392]。

本章小结

本章集中讨论求解矩阵方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的线性代数方法。在分析了只考虑数据向量 $\boldsymbol{b}$ 的扰动 $\boldsymbol{e}$ 的最小二乘方法的不足之后，本章介绍了几种推广的最小二乘方法:

(1) 总体最小二乘方法同时考虑 $\boldsymbol{A}$ 的扰动 $\boldsymbol{E}$ 和 $\boldsymbol{b}$ 的扰动 $\boldsymbol{e}$，优于普通的最小二乘方法。但是，要求扰动矩阵 $\boldsymbol{D}=[-\boldsymbol{e},\boldsymbol{E}]$ 各个噪声分量统计不相关，并具有相同的方差。

(2) 约束总体最小二乘方法可以克服总体最小二乘方法的不足，适用于扰动矩阵 $\boldsymbol{D}=[-\boldsymbol{e},\boldsymbol{E}]$ 的各个噪声分量统计相关，或者虽然统计不相关，但却具有相同方差的情况。

(3) 结构总体最小二乘方法是一种利用矩阵的某些特殊结构的总体最小二乘方法。

此外，本章还介绍了总体最小二乘、约束总体最小二乘和结构总体最小二乘方法的一些重要应用。

习 题

7.1 考虑线性方程 $\boldsymbol{A\theta}+\boldsymbol{\epsilon}=\boldsymbol{x}$，其中，$\boldsymbol{\epsilon}$ 为加性有色噪声向量，满足条件 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{\epsilon}\}=\mathbf{0}$ 和 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{\epsilon}\boldsymbol{\epsilon}^{\mathrm{T}}\}=\boldsymbol{R}$。令 $\boldsymbol{R}$ 已知，并使用加权误差函数 $Q(\boldsymbol{\theta})=\boldsymbol{\epsilon}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{\epsilon}$ 作为求参数向量 $\boldsymbol{\theta}$ 最优估计 $\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{WLS}}$ 的代价函数。这种方法称为加权最小二乘方法。证明

$$\hat{\boldsymbol{\theta}}_{\mathrm{WLS}}=(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{x}$$

其中，加权矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的最优选择为 $\boldsymbol{W}_{\mathrm{opt}}=\boldsymbol{R}^{-1}$。

7.2 已知超定的线性方程 $\boldsymbol{Z}_t^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}_t=\boldsymbol{Z}_t^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Y}_t\boldsymbol{\theta}$，其中，$\boldsymbol{Z}_t\in R^{(t+1)\times K}$ 称为辅助变量矩阵，并且 $t+1>K$。

(1) 令参数向量 $\boldsymbol{\theta}$ 在 t 时刻的估计为 $\hat{\boldsymbol{\theta}}$，求其表达式。这一方法称为辅助变量方法 (instrumental variable method)。

(2) 令

$$\boldsymbol{Y}_{t+1}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{Y}_t\\ \boldsymbol{y}_{t+1}\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{Z}_{t+1}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{Z}_t\\ \boldsymbol{z}_{t+1}\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{X}_{t+1}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_t\\ \boldsymbol{x}_{t+1}\end{bmatrix}$$

求 $\boldsymbol{\theta}_{t+1}$ 的递推计算公式。

7.3 [516] 给定 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n},\boldsymbol{x}\in R^n,\boldsymbol{b}\in R^m,\boldsymbol{C}\in R^{p\times n},\boldsymbol{d}\in R^p$，并且 τ 是一个大于零的数。现在希望求解带有二次约束的最小二乘问题：

$$\min\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2,\quad \boldsymbol{x}\in S(\tau)\tag{1}$$

其中，$S(\tau)$ 是一个向量集合，定义为

$$S(\tau)=\{\boldsymbol{x}:\|\boldsymbol{Cx}-\boldsymbol{d}\|_2\leqslant\tau\}\tag{2}$$

(1) 证明：若 $\|(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{CC}^{\dagger})\boldsymbol{d}\|_2>\tau$，则式 (1) 和式 (2) 所表述的二次约束最小二乘问题无解。

(2) 二次约束最小二乘问题存在显式解，当且仅当存在 $\boldsymbol{z}\in R^n$ 使得

$$\|\boldsymbol{C}[\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}]-\boldsymbol{d}\|_2\leqslant\tau$$

成立，并且对应的显式解由 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\dagger}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})\boldsymbol{z}$ 给出。 (提示: 无约束最小二乘问题 $\min\|\boldsymbol{Ax}-\boldsymbol{b}\|_2$ 的通解为 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}+\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{b}+\mathrm{Range}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A})$。)

7.4 [184] 求解线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{b}$ 的总体最小二乘问题也可以表示为

$$\min_{\boldsymbol{b}+\boldsymbol{e}\in\mathrm{Range}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E})}\|\boldsymbol{D}[\boldsymbol{E},\boldsymbol{e}]\boldsymbol{T}\|_{\mathrm{F}},\quad \boldsymbol{E}\in R^{m\times n},\ \boldsymbol{e}\in R^m$$

式中，$\boldsymbol{D}=\mathrm{diag}(d_1,d_2,\cdots,d_m)$ 和 $\boldsymbol{T}=\mathrm{diag}(t_1,t_2,\cdots,t_{n+1})$ 非奇异。

(1) 证明：若 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) < n$，则上述总体最小二乘问题有一个解，当且仅当 $\boldsymbol{b} \in \text{Range}(\boldsymbol{A})$。

(2) 证明：若 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = n$，$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}^2\boldsymbol{b} = \boldsymbol{0}$，$|t_{n+1}|\|\boldsymbol{Db}\|_2 \geqslant \sigma_n(\boldsymbol{DAT}_1)$，$\boldsymbol{T}_1 = \text{diag}(t_1, t_2, \cdots, t_n)$，则总体最小二乘问题无解。其中，$\sigma_n(\boldsymbol{C})$ 表示矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的第 n 个奇异值。

7.5 考虑上题所述的总体最小二乘问题。证明：若 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{D}[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{b}]\boldsymbol{T} = [\boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{d}]$，并且 $\sigma_n(\boldsymbol{C}) > \sigma_{n+1}(\boldsymbol{C})$，则总体最小二乘解满足 $(\boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}_1 - \sigma_{n+1}^2(\boldsymbol{C})\boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{d}$。

7.6 已知数据点 (1,3), (3,1), (5,7), (4,6), (7,4)，分别求总体最小二乘和一般最小二乘的拟合直线，并分析它们的距离平方和。

7.7 考虑加性白噪声中的谐波恢复问题

$$x(n) = \sum_{i=1}^{p} A_i \sin(2\pi f_1 n + \phi_i) + e(n)$$

其中，A_i, f_i, ϕ_i 分别是第 i 个谐波的幅值、频率和相位，而 $e(n)$ 为加性高斯白噪声。已知上述谐波过程服从特殊 ARMA 模型

$$x(n) + \sum_{i=1}^{2p} a_i x(n-i) = e(n) + \sum_{i=1}^{2p} a_i e(n-i), \quad n = 1, 2, \cdots$$

和差分方程 (修正 Yule-Walker 方程)

$$R_x(k) + \sum_{i=1}^{2p} a_i R_x(k-i) = 0, \quad \forall k$$

并且谐波频率可以通过

$$f_i = \arctan[\text{Im}(z_i)/\text{Re}(z_i)]/2\pi, \quad i = 1, 2, \cdots, p$$

恢复，其中，z_i 是特征多项式

$$A(z) = 1 + \sum_{i=1}^{2p} a_i z^{-i}$$

的共轭根对 (z_i, z_i^*) 的一个根。若

$$x(n) = \sqrt{20}\sin(2\pi\, 0.2n) + \sqrt{2}\sin(2\pi\, 0.213n) + e(n)$$

其中，$e(n)$ 是均值为 0，方差为 1 的标准高斯白噪声，并取 $n = 1, 2, \cdots, 128$。试使用一般的最小二乘方法和奇异值 - 总体最小二乘 (SVD-TLS) 算法分别估计观测数据的 ARMA 模型的 AR 参数 a_i，并估计谐波频率 f_1 和 f_2。假定差分方程个数取为 40，使用最小二乘方法时分别取 $p = 2$ 和 $p = 3$，而总体最小二乘算法取未知参数个数为 14，通过有效奇异值个数的判断，确定谐波个数，然后计算特征多项式的根。从这一计算机仿真实验，你能够得出最小二乘方法和总体最小二乘方法的某些比较结果吗？ (提示：参考习题 6.16)

第8章 特征分析

对一个已知的量确定描述其特征的坐标系，称为特征分析 (eigenanalysis)。特征分析在数学和工程应用中都具有重要的实际意义。例如，在矩阵代数中，特征分析往往与矩阵的谱分析联系在一起：一个线性算子的谱定义为该算子矩阵特征值的集合，而描述线性算子特征的基 (本) 向量定义为其特征向量的集合。但在工程中，谱分析却与 Fourier 分析联系在一起：信号的频谱定义为信号的 Fourier 变换，功率谱定义为频谱模值的平方或自协方差函数的 Fourier 变换。又如，Rayleigh 商是矩阵代数和物理学中一个极其重要的量，它事实上是用特征值和特征向量表示的二次型函数之比。现在，Rayleigh 商已广泛应用在最优化理论、信号处理、模式识别、通信等学科中。

本章将围绕矩阵的特征分析，首先详细讨论矩阵的特征值分解，然后围绕特征值分解的以下推广分别展开专题介绍：矩阵束的广义特征值分解、Rayleigh 商、广义 Rayleigh 商、二次特征值问题以及多个矩阵的联合对角化。最后，将讨论特征分析与 Fourier 分析之间的联系。为了方便读者进一步理解这些理论，还将重点介绍特征值分解、广义特征值分解、Rayleigh 商、广义 Rayleigh 商、二次特征值问题和联合对角化的一些典型应用。

8.1 特征值问题与特征方程

特征值问题既是一个理论上非常有意义的问题，同时又有着广泛的应用。

8.1.1 特征值问题

特征值的基本问题可以陈述为：给定一个 $n\times n$ 维矩阵 $\boldsymbol{A}$，确定标量 λ 的值，使得线性代数方程

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u},\qquad \boldsymbol{u}\neq\boldsymbol{0} \tag{8.1.1}$$

具有 $n\times 1$ 非零解 $\boldsymbol{u}$。这样的标量 λ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 (eigenvalue)，向量 $\boldsymbol{u}$ 称为与 λ 对应的特征向量 (eigenvector)。式 (8.1.1) 有时也被称为特征值 – 特征向量方程式。

由于特征值 λ 和特征向量 $\boldsymbol{u}$ 经常成对出现，因此常将 $(\lambda,\boldsymbol{u})$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对 (eigenpair)。虽然特征值可以取零值，但是特征向量不可以是零向量。

线性变换也存在特征值问题 [20, p.195]：令 $T: R^n\mapsto R^n$ 为一线性变换，称标量 λ 是线性变换 T 的特征值，若 R^n 内存在一个非零向量 $\boldsymbol{x}$ 满足

$$T(\boldsymbol{x})=\lambda\boldsymbol{x} \tag{8.1.2}$$

满足上述关系的非零向量 $\boldsymbol{x}$ 称为线性变换 T 与特征值 λ 对应的特征向量。

一个线性变换 $\boldsymbol{w}=T(\boldsymbol{x})$ 若能够表示为 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，则称 $\boldsymbol{A}$ 是线性变换的标准矩阵 (standard matrix)。显然，如果 $\boldsymbol{A}$ 是线性变换的标准矩阵，则线性变换的特征值问题的表达式 (8.1.2) 可以写作 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$。由此得出下列结论：

(1) 标量 λ 是线性变换 T 的特征值，当且仅当 λ 是该线性变换的标准矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值。

(2) 向量 $\boldsymbol{x}$ 是线性变换 T 与特征值 λ 对应的特征向量，当且仅当 $\boldsymbol{x}$ 是该线性变换的标准矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ 的特征向量。

式 (8.1.1) 意味着，使用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对向量 $\boldsymbol{u}$ 所作的线性变换 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}$ 不改变向量 $\boldsymbol{u}$ 的方向。因此，线性变换 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}$ 是一种"方向不变" 的映射。为了确定向量 $\boldsymbol{u}$，将式 (8.1.1) 改写作

$$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0} \tag{8.1.3}$$

由于上式对任意向量 $\boldsymbol{u}$ 均应该成立，故式 (8.1.3) 存在非零解 $\boldsymbol{u}\neq\boldsymbol{0}$ 的唯一条件是矩阵 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}$ 的行列式等于零，即

$$\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})=0 \tag{8.1.4}$$

应当指出，一个特征值不一定是唯一的，有可能多个特征值取相同的值。同一特征值重复的次数称为特征值的多重度 (multiplicity)。例如，$n\times n$ 单位矩阵的 n 个特征值都等于 1，其多重度为 n。

观察式 (8.1.4)，很容易直接得出下面的重要结果：若特征值问题具有非零解 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$，则标量 λ 必然使 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}$ 奇异。因此，特征值问题的求解由以下两步组成：

(1) 求出所有使矩阵 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}$ 奇异的标量 λ (特征值)；

(2) 给出一个使矩阵 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}$ 奇异的特征值 λ，求出所有满足 $(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 的非零向量 $\boldsymbol{x}$，它就是与 λ 对应的特征向量。

8.1.2 特征多项式

根据矩阵的奇异性和行列式之间的关系知，矩阵 $(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})$ 是奇异矩阵，当且仅当 $\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})=0$，即

$$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})\ \text{奇异} \iff \det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})=0 \tag{8.1.5}$$

因此，矩阵 $(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 的特征矩阵 (characteristic matrix) [383]。当 $\boldsymbol{A}$ 是 $n\times n$ 矩阵时，展开式 (8.1.5) 的左端的行列式，即得到显式的 n 次多项式方程

$$\alpha_0+\alpha_1\lambda+\cdots+\alpha_{n-1}\lambda^{n-1}+(-1)^n\lambda^n=0 \tag{8.1.6}$$

称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征方程，多项式 $\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})$ 称为特征多项式。

为了避免矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ 计算与特征多项式求根问题之间的混淆，常在特征多项式中用 x 代替 λ。

定义 8.1.1 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n \times n$ 矩阵，则 n 阶多项式

$$
\begin{aligned}
p(x) = \det(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I}) &= \begin{vmatrix} a_{11} - x & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - x & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} - x \end{vmatrix} \\
&= p_n x^n + p_{n-1} x^{n-1} + \cdots + p_1 x + p_0
\end{aligned} \tag{8.1.7}
$$

称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式。方程

$$
p(x) = \det(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I}) = 0 \tag{8.1.8}
$$

称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征方程。特征方程的根称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 (eigenvalues，characteristic values，latent values) 或特征根 (characteristic roots，latent roots)。

显然，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个特征值 λ 的计算与特征方程 $p(x) = 0$ 的求根是两个等价的问题。由于特征多项式 $p(x)$ 是变量 x 的 n 阶多项式，特征方程 $p(x) = 0$ 不可能有多于 n 个不同的根。即是说，矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 共有 n 个特征值。一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 能够产生一个特征多项式。同样，每一个 n 次多项式也可以写成一个 $n \times n$ 矩阵的特征多项式 [36]。

定理 8.1.1 任何一个多项式

$$
p(\lambda) = \lambda^n + a_1 \lambda^{n-1} + \cdots + a_{n-1}\lambda + a_n
$$

都可以写成 $n \times n$ 矩阵

$$
\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -a_1 & -a_2 & \cdots & -a_{n-1} & -a_n \\ -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 \end{bmatrix}
$$

的特征多项式，即有 $p(\lambda) = \det(\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A})$。

证明 按照第 1 列计算行列式，得

$$
\begin{aligned}
f(\lambda) = \det(\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}) &= \begin{vmatrix} \lambda + a_1 & a_2 & \cdots & a_{n-1} & a_n \\ 1 & \lambda & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & \lambda \end{vmatrix} \\
&= (\lambda + a_1) \begin{vmatrix} \lambda & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & \lambda \end{vmatrix} + 1^{1+2} \begin{vmatrix} a_2 & a_3 & \cdots & 0 \\ 1 & \lambda & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \cdots & 1 & \lambda \end{vmatrix}
\end{aligned}
$$

第一个行列式等于 λ^{n-1}，再依次按照第 1 列计算第二个行列式，得

$$f(\lambda)=(\lambda+a_1)\lambda^{n-1}+a_2\begin{vmatrix}a_3 & a_4 & \cdots & a_n\\ 1 & \lambda & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & 1 & \lambda\end{vmatrix}+1^{1+2}\begin{vmatrix}a_3 & a_4 & \cdots & 0\\ 1 & \lambda & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & 1 & \lambda\end{vmatrix}$$

$$=\lambda^n+a_1\lambda^{n-1}+a_2\lambda^{n-2}+a_3\begin{vmatrix}\lambda & 0 & \cdots & 0\\ 1 & \lambda & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & 1 & \lambda\end{vmatrix}+1^{1+2}\begin{vmatrix}a_3 & a_4 & \cdots & 0\\ 1 & \lambda & \cdots & 0\\ \vdots & \ddots & \ddots & \vdots\\ 0 & \cdots & 1 & \lambda\end{vmatrix}$$

式右第一个行列式等于 λ^{n-3}，再按照第 1 列展开第二个行列式。依此类推，即得

$$f(\lambda)=\lambda^n+a_1\lambda^{n-1}+a_2\lambda^{n-2}+a_3\lambda^{n-3}+\cdots+a_{n-1}\lambda+a_n$$

式右恰好就是 $p(\lambda)$。因此，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式 $\det(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})$ 与多项式 $p(\lambda)$ 相等。 ■

8.2 特征值与特征向量

本节重点讨论矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值与特征向量的有关计算及性质。

8.2.1 特征值

根据代数学基本定理知，即使矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是实的，特征方程的根也可能是复的，而且根的多重数可以是任意的，甚至可以是 n 重根。这些根统称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值。

关于特征值，有必要先集中介绍以下术语 [397, p.15]：

(1) 称 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ 具有代数多重度 (algebraic multiplicity) μ，若 λ 是特征多项式 $\det(\boldsymbol{A}-z\boldsymbol{I})=0$ 的 μ 重根。

(2) 若特征值 λ 的代数多重度为 1，则称该特征值为单特征值 (simple eigenvalue)。非单的特征值称为多重特征值 (multiple eigenvalue)。

(3) 称 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 λ 具有几何多重度 (geometric multiplicity) γ，若与 λ 对应的线性无关特征向量的个数为 γ。换言之，几何多重度 γ 是特征空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})$ 的维数。

(4) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为减次矩阵 (derogatory matrix)，若至少有一个特征值的几何多重度大于 1。

(5) 一特征值称为半单特征值 (semi-simple eigenvalue)，若它的代数多重度等于它的几何多重度。不是半单的特征值称为亏损特征值 (defective eigenvalue)。

几何多重度还有另外一种定义，将在稍后介绍。

众所周知，任何一个 n 阶多项式 $p(x)$ 都可以写成因式分解形式

$$p(x)=a(x-x_1)(x-x_2)\cdots(x-x_n) \tag{8.2.1}$$

注意，特征多项式 $p(x)$ 的 n 个根 $x_1, x_2, \cdots, x_n$ 不一定是各不相同的，也不一定就是实的。

一般说来，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值是各不相同的。若特征多项式存在多重根，则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有退化特征值 (degenerate enginvalue)。

需要注意的是，即使矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是实矩阵，其特征值也有可能是复的。以第 4 章的 Givens 旋转矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix}$$

为例，其特征方程

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I}) = \begin{vmatrix} \cos\theta - \lambda & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta - \lambda \end{vmatrix} = (\cos\theta - \lambda)^2 + \sin^2\theta = 0$$

然而，若 θ 不是 π 的整数倍，则 $\sin^2\theta > 0$。此时，特征方程不可能有 λ 的实根，即 Givens 旋转矩阵的两个特征值都为复数，与它们对应的特征向量也是复向量。

下面讨论特征值的一些重要性质。

性质 1 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 奇异，当且仅当特征值 $\lambda = 0$。

证明 先证充分条件。将特征值 $\lambda = 0$ 代入特征方程，得 $\det(\boldsymbol{A}) = 0$，从而知矩阵 $\boldsymbol{A}$ 奇异。再证必要条件。假定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 奇异，则 $\det(\boldsymbol{A}) = 0$，或者等价写作 $\det(\boldsymbol{A} - 0\boldsymbol{I}) = 0$。因此，在矩阵 $\boldsymbol{A}$ 奇异的情况下 $\lambda = 0$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值。 ■

性质 2 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 具有相同的特征值。

证明 由行列式的性质：对于任何矩阵 $\boldsymbol{B}$，恒有 $\det(\boldsymbol{B}) = \det(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})$。因此，若 λ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，则有

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I}) = \det[(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I})^{\mathrm{T}}] = \det(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} - \lambda\boldsymbol{I}) = 0$$

最后一个特征方程说明，λ 也是转置矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的特征值，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 具有相同的特征值。 ■

性质 3 若 λ 是 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，则有

(1) λ^k 是矩阵 $\boldsymbol{A}^k$ 的特征值。

(2) 若 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 具有特征值 $1/\lambda$。

(3) 矩阵 $\boldsymbol{A} + \sigma^2\boldsymbol{I}$ 的特征值为 $\lambda + \sigma^2$。

证明 (1) 用归纳法证明。先证明对 $k = 2$,λ^2 是 $\boldsymbol{A}^2$ 的特征值。假定 $(\lambda, \boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，即 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}$，其中，$\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}$。此式两边左乘矩阵 $\boldsymbol{A}$ 后，得 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}) = \boldsymbol{A}(\lambda\boldsymbol{u})$，从而有

$$\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{u} = \lambda(\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}) = \lambda(\lambda\boldsymbol{u}) = \lambda^2\boldsymbol{u}, \quad \boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}$$

这意味着 $(\lambda^2, \boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}^2$ 的特征对。现在假定 $(\lambda^{k-1}, \boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}^{k-1}$ 的特征对，即 $\boldsymbol{A}^{k-1}\boldsymbol{u} = \lambda^{k-1}\boldsymbol{u}$ 成立。在此式两边左乘矩阵 $\boldsymbol{A}$，立即有

$$\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{u} = \lambda(\boldsymbol{A}^{k-1}\boldsymbol{u}) = \lambda(\lambda^{k-1}\boldsymbol{u}) = \lambda^k\boldsymbol{u}, \quad \boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}$$

这就证明了 λ^k 是 $\boldsymbol{A}^k$ 的特征值。

(2) 因为 λ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，故 $\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})=0$。若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆，则有

$$0=\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})=\det[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{I}-\lambda\boldsymbol{A}^{-1})]=\det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{I}-\lambda\boldsymbol{A}^{-1})$$

当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可逆时，行列式 $\det(\boldsymbol{A})\neq 0$，故上式意味着 $\det(\boldsymbol{I}-\lambda\boldsymbol{A}^{-1})=0$，或等价为

$$\det\left(\boldsymbol{A}^{-1}-\frac{1}{\lambda}\boldsymbol{I}\right)=0$$

这表明，$1/\lambda$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的特征值。

(3) 令 λ_A 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，而 λ 是矩阵 $\boldsymbol{A}+\sigma^2\boldsymbol{I}$ 的特征值，则有 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda_A\boldsymbol{u}$ 和 $(\boldsymbol{A}+\sigma^2\boldsymbol{I})\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}$。综合这两式，得 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=(\lambda-\sigma^2)\boldsymbol{u}=\lambda_A\boldsymbol{u}$，故 $\lambda=\lambda_A+\sigma^2$ 对矩阵 $\boldsymbol{A}+\sigma^2\boldsymbol{I}$ 的每一个特征值均成立。 ■

若 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有 n 个不同的特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$，其中，$m\geqslant n$，则存在一个非奇异的 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{T}$ 使得 $\boldsymbol{I}=\boldsymbol{T}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{T}^{-1}$，其中，$\boldsymbol{\Lambda}$ 为 Jordan 型，即

$$\boldsymbol{\Lambda}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Lambda}_1 & & \boldsymbol{O}\\ & \ddots & \\ \boldsymbol{O} & & \boldsymbol{\Lambda}_k\end{bmatrix} \tag{8.2.2}$$

为块对角矩阵，定义为

$$\boldsymbol{\Lambda}_i=\begin{bmatrix}\lambda_{n_i} & 1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & \lambda_{n_i} & 1 & & 0\\ 0 & 0 & \lambda_{n_i} & \ddots & \vdots\\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & 1\\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \lambda_{n_i}\end{bmatrix},\quad i=1,2,\cdots,k\geqslant n \tag{8.2.3}$$

式 (8.2.2) 所示矩阵分解称为 Jordan 型分解。Jordan 块矩阵主对角线的相同特征值 λ_{n_i} 重复出现的个数称为该特征值的几何多重度 (geometric multiplicity)。这是几何多重度的第二种定义。

8.2.2 特征向量

若矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 是一个一般的复矩阵，并且 λ 是其特征值，则满足

$$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{v}=\boldsymbol{0}\quad 或\quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{v}=\lambda\boldsymbol{v} \tag{8.2.4}$$

的向量 $\boldsymbol{v}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ 对应的右特征向量，而满足

$$\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})=\boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}\quad 或\quad \boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\lambda\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}} \tag{8.2.5}$$

的向量 $\boldsymbol{u}$ 称为 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ 对应的左特征向量。

若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为 Hermitian 矩阵，则由于其所有特征值为实数，立即知 $\boldsymbol{v}=\boldsymbol{u}$，即 Hermitian 矩阵的左和右特征向量相同。

有必要对矩阵的奇异值分解与特征值分解之间的联系与区别作一番比较：

(1) 奇异值分解适用于任何 $m\times n$ 长方形矩阵 ($m\geqslant n$ 或者 $m<n$ 均可)，特征值分解只适用于正方矩阵。

(2) 即使是同一个 $n\times n$ 非 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$，奇异值和特征值的定义也是完全不同的：奇异值定义式为式 (6.2.16)，即

$$\sigma_k=\min_{\boldsymbol{E}\in C^{m\times n}}\{\|\boldsymbol{E}\|_{\mathrm{F}}:\operatorname{rank}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{E})\leqslant k-1\},\quad k=1,2,\cdots,\min\{m,n\}\tag{8.2.6}$$

换言之，奇异值与使得原矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩减小 1 的误差矩阵 $\boldsymbol{E}_k$ 的 Frobenius 范数等价。与之不同，特征值则定义为特征多项式 $\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})=0$ 的根。同一个正方矩阵的奇异值和特征值之间没有内在的关系，但是 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的非零奇异值是 $n\times n$ Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 或 $m\times m$ Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的非零特征值的正平方根。

(3) $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与奇异值 σ_i 对应的左奇异向量 $\boldsymbol{u}_i$ 和右奇异向量 $\boldsymbol{v}_i$ 定义为满足 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i=\sigma_i$ 的两个向量，而 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左和右特征向量则分别由 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=\lambda_i\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i=\lambda_i\boldsymbol{v}_i$ 定义。因此，对于同一个 $n\times n$ 非 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$，它的 (左和右) 奇异向量与 (左和右) 特征向量之间也没有内在的关系。然而，矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}$ 的左奇异向量 $\boldsymbol{u}_i$ 是 $m\times m$ Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的特征向量，因为

$$\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_i)^{\mathrm{H}}=\sigma_i\sigma_i^*\Rightarrow\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{u}_i=\lambda_i=\sigma_i^2$$

类似地，矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}$ 的右奇异向量 $\boldsymbol{v}_i$ 是 $n\times n$ Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 的特征向量。

在下面的讨论中，如无特别申明，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量系指右特征向量，并且用 $\boldsymbol{u}$ 表示。

命题 8.2.1 令 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_k$ 是 $n\times n$ 一般矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与不同特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_k$ 相对应的特征向量，即

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i=\lambda_i\boldsymbol{u}_i,\quad i=1,2,\cdots,k;\ k\leqslant n\tag{8.2.7}$$

$$\lambda_i\neq\lambda_j,\quad i\neq j;\ 1\leqslant i,j\leqslant k\tag{8.2.8}$$

则这 k 个特征向量的集合 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_k\}$ 是一个线性无关集合。

证明 [240] 利用反证法证明。假设子集合 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_k\}$ 线性相关。此时，某个子集合一定是线性相关的。这意味着，存在一个整数 m $(2\leqslant m\leqslant k)$ 使得

(1) 子集合 $S_1=\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_{m-1}\}$ 是线性无关的；

(2) 子集合 $S_2=\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_m\}$ 是线性相关的。

由于 S_2 线性相关，故存在标量 $\alpha_1,\alpha_1,\cdots,\alpha_m$ 使得

$$\alpha_1\boldsymbol{u}_1+\cdots+\alpha_{m-1}\boldsymbol{u}_{m-1}+\alpha_m\boldsymbol{u}_m=\boldsymbol{0}\tag{1}$$

式中，$\alpha_1,\alpha_1,\cdots,\alpha_m$ 不全部为零，并且 $\alpha_m \neq 0$。这是因为，若 $\alpha_m = 0$，则式 (1) 说明 S_1 线性相关，与假设矛盾。

用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 左乘式 (1) 两边，并代入 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i$，即有

$$\alpha_1\lambda_1\boldsymbol{u}_1 + \cdots + \alpha_{m-1}\lambda_{m-1}\boldsymbol{u}_{m-1} + \alpha_m\lambda_m\boldsymbol{u}_m = \boldsymbol{0} \tag{2}$$

式 (1) 两边同乘 λ_m，得

$$\alpha_1\lambda_m\boldsymbol{u}_1 + \cdots + \alpha_{m-1}\lambda_m\boldsymbol{u}_{m-1} + \alpha_m\lambda_m\boldsymbol{u}_m = \boldsymbol{0} \tag{3}$$

式 (3) 减去式 (2)，结果为

$$\alpha_1(\lambda_m - \lambda_1)\boldsymbol{u}_1 + \alpha_2(\lambda_m - \lambda_2)\boldsymbol{u}_2 + \cdots + \alpha_{m-1}(\lambda_m - \lambda_{m-1})\boldsymbol{u}_{m-1} = \boldsymbol{0}$$

令 $\beta_i = \alpha_i(\lambda_m - \lambda_i)$, $1 \leqslant i \leqslant m-1$，即可将上式改写为

$$\beta_1\boldsymbol{u}_1 + \beta_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + \beta_{m-1}\boldsymbol{u}_{m-1} = \boldsymbol{0}$$

由于子集合 S_1 是线性无关的，所以上式成立的条件是

$$\beta_1 = \beta_2 = \cdots = \beta_{m-1} = 0$$

或者

$$\alpha_i(\lambda_m - \lambda_i) = 0, \quad i = 1, 2, \cdots, m-1$$

因为特征值各不相同，上式给出结果 $\alpha_i = 0,\ \forall\, 1 \leqslant i \leqslant m-1$。

当 $\alpha_i = 0,\ \forall\, 1 \leqslant i \leqslant m-1$ 时，式 (1) 简化为 $\alpha_m\boldsymbol{u}_m = \boldsymbol{0}$。这意味着 $\boldsymbol{u}_m = \boldsymbol{0}$，因为前面已证明过 $\alpha_m \neq 0$。但是，$\boldsymbol{u}_m = \boldsymbol{0}$ 与任何特征向量不得为零向量相矛盾，故集合 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_k\}$ 线性相关这一假设不能成立。因此，$\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_k\}$ 线性无关。 ■

若 $k = n$，则命题 8.2.1 的结果为下列推论。

推论 8.2.1　令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n \times n$ 一般矩阵。若 $\boldsymbol{A}$ 具有不同的 n 个特征值，则 $\boldsymbol{A}$ 具有 n 个线性无关的特征向量。

另一方面，从式 (8.1.1) 容易看出，一个特征向量乘以任一非零的标量后，仍然满足式 (8.1.1)，即还是特征向量。为了避免特征向量的多值性，通常定义特征向量总是具有单位内积 (或者单位范数)，即约定 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u} = 1$。

若 $(\lambda, \boldsymbol{u})$ 是 $n \times n$ 实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，则 $(\lambda^*, \boldsymbol{u}^*)$ 也是实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对。

证明　由于 $\boldsymbol{A}$ 是实矩阵，故有 $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{u})^* = \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}^*$，式中，$*$ 为复数共轭。利用这一结果和已知条件 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}$，易知 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}^* = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{u})^* = (\lambda\boldsymbol{u})^* = \lambda^*\boldsymbol{u}^*$。这一结果表明，$(\lambda^*, \boldsymbol{u}^*)$ 也是实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对。 ■

如果一个普通的 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 已求出了不同的特征值，那么如何求与这些特征值对应的特征向量呢？答案是简单的：只要利用高斯消去法求解方程 $(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{0}$，得到与每个已知 λ 对应的非零解 $\boldsymbol{x}$ 即可。

下面通过一个例子说明如何分步求出一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值、对应的特征向量和对角化。

例 8.2.1 已知一个 3×3 实矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 3 & 3 \\ -2 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

是非对称的一般矩阵。直接计算知，特征多项式

$$\det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}) = \begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 & 1 \\ 0 & 3-\lambda & 3 \\ -2 & 1 & 1-\lambda \end{vmatrix} = -\lambda(\lambda-2)(\lambda-3)$$

求解特征方程 $\det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}) = 0$ 得到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 3 个特征值 $\lambda = 0, 2, 3$。

(1) 对于特征值 $\lambda = 0$，有 $(\boldsymbol{A} - 0\boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，即有

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 + x_3 &= 0 \\ 3x_2 + 3x_3 &= 0 \\ -2x_1 + x_2 + x_3 &= 0 \end{aligned}$$

其解为 $x_1 = 0$ 和 $x_2 = -x_3$，其中，x_3 任意。因此，与特征值 $\lambda = 0$ 对应的特征向量为

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} 0 \\ -a \\ a \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} 0 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad a \neq 0$$

取 $a = 1$，得特征向量为 $\boldsymbol{x}_1 = [0, \ -1, \ 1]^{\mathrm{T}}$。

(2) 对于特征值 $\lambda = 2$，有 $(\boldsymbol{A} - 2\boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，即

$$\begin{aligned} -x_1 + x_2 + x_3 &= 0 \\ x_2 + 3x_3 &= 0 \\ -2x_1 + x_2 - x_3 &= 0 \end{aligned}$$

其解为 $x_1 = -2x_3, x_2 = -3x_3$，其中，x_3 任意。因此，与特征值 $\lambda = 2$ 对应的特征向量为

$$\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} -2a \\ -3a \\ a \end{bmatrix} = a \begin{bmatrix} -2 \\ -3 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad a \neq 0$$

取 $a = 1$，得特征向量为 $\boldsymbol{x}_2 = [-2, \ -3, \ 1]^{\mathrm{T}}$。

(3) 类似地，与 $\lambda = 3$ 对应的特征向量为 $\boldsymbol{x}_3 = [1, \ 2, \ 0]^{\mathrm{T}}$。三个特征向量组成矩阵

$$\boldsymbol{U} = \begin{bmatrix} 0 & -2 & 1 \\ -1 & -3 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

其逆矩阵为

$$U^{-1}=\begin{bmatrix}1 & -1/2 & 1/2\\ -1 & 1/2 & 1/2\\ -1 & 1 & 1\end{bmatrix}$$

于是，矩阵 A 的对角化结果为

$$\begin{aligned}U^{-1}AU&=\begin{bmatrix}1 & -1/2 & 1/2\\ -1 & 1/2 & 1/2\\ -1 & 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 1 & 1\\ 0 & 3 & 3\\ -2 & 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & -2 & 1\\ -1 & -3 & 2\\ 1 & 1 & 0\end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}1 & -1/2 & 1/2\\ -1 & 1/2 & 1/2\\ -1 & 1 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}0 & -4 & 3\\ 0 & -6 & 6\\ 0 & 2 & 0\end{bmatrix}\\ &=\begin{bmatrix}0 & 0 & 0\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 3\end{bmatrix}\end{aligned}$$

它恰好就是由矩阵 A 的三个不同特征值 $0,2,3$ 构成的对角矩阵。

8.2.3 与其他矩阵函数的关系

一个矩阵的特征值与矩阵的其他标量函数有着密切的关系。这里先引出特征值的条件数的定义。

定义 8.2.1 [397, p.93] 任意一个矩阵 A 的单个特征值 λ 的条件数定义为

$$\text{cond}(\lambda)=\frac{1}{\cos\theta(\boldsymbol{u},\boldsymbol{v})} \tag{8.2.9}$$

式中，$\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}$ 分别是与特征值 λ 对应的左和右特征向量。

例 8.2.2 [397, p.93] 考虑矩阵

$$A=\begin{bmatrix}-149 & -50 & -154\\ 537 & 180 & 546\\ -27 & -9 & -25\end{bmatrix}$$

其特征值为 $\{1,2,3\}$。与特征值 $\lambda=1$ 对应的左和右特征向量分别为

$$\boldsymbol{u}=\begin{bmatrix}0.6810\\ 0.2253\\ 0.6967\end{bmatrix}$$

和

$$\boldsymbol{v}=\begin{bmatrix}0.3162\\ -0.9487\\ 0.0000\end{bmatrix}$$

相应的条件数 $\text{cond}(\lambda_1)\approx 603.64$。这说明矩阵元素 0.01 数量级的扰动将引起特征值 λ_1 最大 6 倍的变化。例如，元素 a_{11} 扰动到 -149.01，则矩阵 A 的特征值变为

$$\{0.2287, 3.2878, 2.4735\}$$

下面讨论一个矩阵的所有特征值的集合与该矩阵的谱分析、行列式、迹之间的关系。

1. 与矩阵的谱分析的关系

定义 8.2.2 矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{n\times n}$ 的所有特征值 $\lambda \in C$ 的集合称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱，记作 $\lambda(\boldsymbol{A})$。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的谱半径是非负实数，定义为

$$\rho(\boldsymbol{A}) = \max|\lambda| : \lambda \in \lambda(\boldsymbol{A}) \tag{8.2.10}$$

由于 $\rho(\boldsymbol{A})$ 是包含 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征值在圆内或圆上的最小圆盘的半径，圆心在复平面的原点，故名谱半径。

令 $\lambda(\boldsymbol{A}) = \{\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n\}$，则

$$\det(\boldsymbol{A}) = \lambda_1\lambda_2\cdots\lambda_n \tag{8.2.11}$$

显然，若 $\boldsymbol{A}$ 具有零特征值，则 $\det(\boldsymbol{A}) = 0$，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 奇异。反之，若 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征值都不等于零，则 $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异。

2. 与矩阵的行列式和迹的关系

令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n \times n$ 矩阵，且 $\boldsymbol{D} = x\boldsymbol{I}_n$。考虑矩阵的对角展开 (diagonal expansion) $|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{D}|$。以 $n = 3$ 为例，则有

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{D}| &= \begin{vmatrix} a_{11}+x & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22}+x & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33}+x \end{vmatrix} \\ &= x^3 + x^2(a_{11}+a_{22}+a_{33}) + x\left(\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22}\end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} \\ a_{31} & a_{33}\end{vmatrix} + \begin{vmatrix} a_{22} & a_{23} \\ a_{32} & a_{33}\end{vmatrix}\right) + \\ &\quad \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{vmatrix}\end{aligned}$$

定义

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}_1(\boldsymbol{A}) &= a_{11}+a_{22}+a_{33} \\ \mathrm{tr}_2(\boldsymbol{A}) &= \text{矩阵 } \boldsymbol{A} \text{ 所有二阶主子式之和} \\ \mathrm{tr}_3(\boldsymbol{A}) &= \text{矩阵 } \boldsymbol{A} \text{ 所有三阶主子式之和} \end{aligned}$$

则对角展开可以表示为

$$|\boldsymbol{A}+\boldsymbol{D}| = x^3 + x^2\mathrm{tr}_1(\boldsymbol{A}) + x\,\mathrm{tr}_2(\boldsymbol{A}) + \mathrm{tr}_3(\boldsymbol{A})$$

推而广之，对于 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，其对角展开具有形式

$$|\boldsymbol{A}+x\boldsymbol{I}_n| = x^n + x^{n-1}\mathrm{tr}_1(\boldsymbol{A}) + x^{n-2}\mathrm{tr}_2(\boldsymbol{A}) + \cdots + x\,\mathrm{tr}_{n-1}(\boldsymbol{A}) + \mathrm{tr}_n(\boldsymbol{A}) \tag{8.2.12}$$

式中，$\mathrm{tr}_i(\boldsymbol{A})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有 i 阶主子式之和。根据这一定义知

$$\mathrm{tr}_1(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{n} a_{ii} = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) \tag{8.2.13}$$

$$\mathrm{tr}_n(\boldsymbol{A}) = |\boldsymbol{A}| = \det(\boldsymbol{A}) \tag{8.2.14}$$

利用对角展开公式 (8.2.12)，可得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式 $|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}_n|=0$ 为

$$\begin{aligned}|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}_n| &= (-\lambda)^n+(-\lambda)^{n-1}\text{tr}_1(\boldsymbol{A})+(-\lambda)^{n-2}\text{tr}_2(\boldsymbol{A})+\cdots+(-\lambda)\text{tr}_{n-1}(\boldsymbol{A})+\text{tr}_n(\boldsymbol{A})\\ &= (-\lambda)^n+(-\lambda)^{n-1}\text{tr}(\boldsymbol{A})+(-\lambda)^{n-2}\text{tr}_2(\boldsymbol{A})+\cdots+(-\lambda)\text{tr}_{n-1}(\boldsymbol{A})+|\boldsymbol{A}|\\ &=0\end{aligned} \tag{8.2.15}$$

假设 n 阶特征多项式 $|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}_n|=0$ 的 n 个根是 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ (某些根可能是多重根)，则有

$$|\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}_n|=(\lambda_1-\lambda)(\lambda_2-\lambda)\cdots(\lambda_n-\lambda)=0$$

展开后为

$$(-\lambda)^n+(-\lambda)^{n-1}\sum_{i=1}^{n}\lambda_i+(-\lambda)^{n-2}\sum_{i=1,\ i\neq j}^{n}\sum_{j=1}^{n}\lambda_i\lambda_j+\cdots+\prod_{i=1}^{n}\lambda_i=0 \tag{8.2.16}$$

分别比较式 (8.2.15) 和式 (8.2.16) 中 $(-\lambda)^{n-1}$ 的系数和常数项，立即得到

$$\text{tr}(\boldsymbol{A})=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i \tag{8.2.17}$$

$$\det(\boldsymbol{A})=\prod_{i=1}^{n}\lambda_i \tag{8.2.18}$$

这表明，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的迹等于其所有特征值之和，而行列式 $|\boldsymbol{A}|$ 等于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 所有特征值的乘积。这就是矩阵特征值与行列式、迹之间的关系。

式 (8.2.18) 也可以利用式 (8.4.5) 导出。由于酉矩阵的行列式等于 1，由式 (8.4.5) 易知

$$\det(\boldsymbol{A})=\det(\boldsymbol{U})\det(\boldsymbol{\Sigma})\det(\boldsymbol{U}^{\text{H}})=\det(\boldsymbol{\Sigma})$$

故有 $\det(\boldsymbol{A})=\prod_{i=1}^{n}\lambda_i$。

令 $\boldsymbol{s}(t)=[s_1(t),s_2(t),\cdots,s_n(t)]^{\text{T}}$ 表示 n 个信号组成的向量，且 $\boldsymbol{R}_s=\text{E}\{\boldsymbol{s}(t)\boldsymbol{s}^{\text{H}}(t)\}$ 表示信号向量 $\boldsymbol{s}(t)$ 的相关矩阵，即

$$\boldsymbol{R}_s=\begin{bmatrix}\text{E}\{|s_1(t)|^2\} & \text{E}\{s_1(t)s_2^*(t)\} & \cdots & \text{E}\{s_1(t)s_n^*(t)\}\\ \text{E}\{s_2(t)s_1^*(t)\} & \text{E}\{|s_2(t)|^2\} & \cdots & \text{E}\{s_2(t)s_n^*(t)\}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \text{E}\{s_n(t)s_1^*(t)\} & \text{E}\{s_n(t)s_2^*(t)\} & \cdots & \text{E}\{|s_n(t)|^2\}\end{bmatrix}$$

假定其 n 个特征特征值为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$。利用矩阵的迹的定义知

$$\text{tr}(\boldsymbol{R}_s)=\sum_{i=1}^{n}\text{E}\{|s_i(t)|^2\}=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i \tag{8.2.19}$$

即是说，相关矩阵 $\boldsymbol{R}_s$ 的特征值之和反映 n 个信号能量之和。

定义 8.2.3 对称矩阵 $\boldsymbol{A} \in R^{n\times n}$ 的惯性 $\text{In}(\boldsymbol{A})$ 定义为三元组

$$\text{In}(\boldsymbol{A}) = (i_+(\boldsymbol{A}), i_-(\boldsymbol{A}), i_0(\boldsymbol{A}))$$

其中，$i_+(\boldsymbol{A}), i_-(\boldsymbol{A})$ 和 $i_0(\boldsymbol{A})$ 分别是 $\boldsymbol{A}$ 的正、负和零特征值的个数 (多重特征值全部计算多重数在内)。另外，量 $i_+(\boldsymbol{A}) - i_-(\boldsymbol{A})$ 叫做 $\boldsymbol{A}$ 的符号差 (signature)。

显然，对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩由 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = i_+(\boldsymbol{A}) + i_-(\boldsymbol{A})$ 决定。

下面是关于矩阵惯性的几个引理。

引理 8.2.1 (Sylvester 惯性律) 给定一个对称矩阵 $\boldsymbol{H}$ 和一个相同维数的非奇异矩阵 $\boldsymbol{U}$，则 $\text{In}(\boldsymbol{A}) = \text{In}(\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}^{\text{T}})$。

引理 8.2.2 (增广系统的惯性)[186, Lemma 3.4] 给定一个 $n \times n$ 对称矩阵和一个 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{J}$。令 $r = \text{rank}(\boldsymbol{J})$，并且矩阵 $\boldsymbol{N}$ 的列向量组成矩阵 $\boldsymbol{J}$ 的零空间的一组基。若矩阵 $\boldsymbol{K}$ 定义为

$$\boldsymbol{K} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{H} & \boldsymbol{J}^{\text{T}} \\ \boldsymbol{J} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}$$

则

$$\text{In}(\boldsymbol{K}) = \text{In}(\boldsymbol{N}^{\text{T}}\boldsymbol{H}\boldsymbol{N}) + (r, r, m - r)$$

引理 8.2.3 [158, Proposition 2] 给定一个 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{H}$，一个 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{J}$ 和一个 $n \times n$ 对称的半正定矩阵 $\boldsymbol{D}$。令 $r = \text{rank}(\boldsymbol{J} - \boldsymbol{D})$，并且矩阵 $\boldsymbol{U}_0$ 的列向量组成 $\boldsymbol{D}$ 的零空间的一组基，矩阵 $\boldsymbol{N}$ 的列向量组成 $\boldsymbol{U}_0^{\text{T}}\boldsymbol{J}$ 的零空间的一组基。若 $\boldsymbol{D}^{\dagger}$ 是 $\boldsymbol{D}$ 的 Moore-Penrose 逆矩阵，并且 $\boldsymbol{D}$ 的零空间的维数为 m_0，则 $\text{rank}(\boldsymbol{U}_0^{\text{T}}\boldsymbol{J}) = m_0 - m + r$。若定义 $\boldsymbol{H}_C = \boldsymbol{H} + \boldsymbol{J}^{\text{T}}\boldsymbol{D}^{\dagger}\boldsymbol{J}$，且

$$\boldsymbol{K} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{H} & \boldsymbol{J}^{\text{T}} \\ \boldsymbol{J} & \boldsymbol{N} \end{bmatrix}$$

则

$$\text{In}(\boldsymbol{K}) = \text{In}(\boldsymbol{N}^{\text{T}}\boldsymbol{H}_C\boldsymbol{N}) + (m_0 - m + r, r, m - r)$$

3. 矩阵多项式的特征值

考虑矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 次多项式

$$f(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{A}^n + c_1\boldsymbol{A}^{n-1} + \cdots + c_{n-1}\boldsymbol{A} + c_n\boldsymbol{I} \tag{8.2.20}$$

若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有特征对 $(\lambda, \boldsymbol{u})$，即 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}$，则由于

$$\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \lambda^2\boldsymbol{u}$$

$$\boldsymbol{A}^3\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{u} = \lambda^3\boldsymbol{u}$$

$$\cdots$$

$$\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{u} = \lambda^n\boldsymbol{u}$$

立即有

$$\begin{aligned}&(\boldsymbol{A}^n+c_1\boldsymbol{A}^{n-1}+\cdots+c_{n-1}\boldsymbol{A}+c_n\boldsymbol{I})\boldsymbol{u}\\&=\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{u}+c_1\boldsymbol{A}^{n-1}\boldsymbol{u}+\cdots+c_{n-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}+c_n\boldsymbol{u}\\&=\lambda^n\boldsymbol{u}+c_1\lambda^{n-1}\boldsymbol{u}+\cdots+c_{n-1}\lambda\boldsymbol{u}+c_n\boldsymbol{u}\\&=(\lambda^n+c_1\lambda^{n-1}+\cdots+c_{n-1}\lambda+c_n)\boldsymbol{u}\end{aligned}\tag{8.2.21}$$

令矩阵多项式 $f(\boldsymbol{A})$ 的特征值为 $f(\lambda)$，即

$$f(\boldsymbol{A})\boldsymbol{u}=f(\lambda)\boldsymbol{u}\tag{8.2.22}$$

则由式 (8.2.21) 和式 (8.2.22) 易知

$$f(\lambda)=\lambda^n+c_1\lambda^{n-1}+\cdots+c_{n-1}\lambda+c_n\tag{8.2.23}$$

是矩阵多项式 $f(\boldsymbol{A})$ 的特征值。

标量 x 的幂级数定义为 $\mathrm{e}^x=1+x+x^2/2!+x^3/3!+\cdots$。类似地，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的幂级数定义为

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}+\frac{1}{2!}\boldsymbol{A}^2+\frac{1}{3!}\boldsymbol{A}^3+\cdots=\sum_{i=0}^{\infty}\frac{1}{i!}\boldsymbol{A}^i\tag{8.2.24}$$

假定级数收敛。若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 λ，则由矩阵多项式的特征值表示式 (8.2.23)，立即知矩阵的指数函数 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$ 的特征值为

$$f(\lambda)=\sum_{i=0}^{\infty}\lambda^i/i!=\mathrm{e}^{\lambda}\tag{8.2.25}$$

8.2.4 特征值和特征向量的性质

前面分析了特征值和特征向量一些典型的性质。事实上，一个 $n\times n$ 矩阵 (不一定是 Hermitian 矩阵) $\boldsymbol{A}$ 的特征值具有广泛的性质，详见下面的汇总 [224]。

(1) $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 共有 n 个特征值，其中，多重特征值按照其多重度计数。

(2) 若 $\boldsymbol{A}$ 是实对称矩阵或 Hermitian 矩阵，则其所有特征值都是实数。

(3) 关于对角矩阵与三角矩阵的特征值：

① 若 $\boldsymbol{A}=\mathrm{diag}(a_{11},a_{22},\cdots,a_{nn})$，则其特征值为 $a_{11},a_{22},\cdots,a_{nn}$。

② 若 $\boldsymbol{A}$ 为三角矩阵，则其对角元素是所有的特征值。

(4) 对一个 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$：

① 若 λ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，则 λ 也是 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的特征值。

② 若 λ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，则 λ^* 是 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的特征值。

③ 若 λ 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，则 $\lambda+\sigma^2$ 是 $\boldsymbol{A}+\sigma^2\boldsymbol{I}$ 的特征值。

④ 若 λ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，则 $1/\lambda$ 是逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的特征值。

(5) 幂等矩阵 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$ 的所有特征值取 0 或者 1。

(6) 若 $\boldsymbol{A}$ 是实正交矩阵，则其所有特征值为 1 或者 -1。

(7) 特征值与矩阵奇异性的关系：

① 若 $\boldsymbol{A}$ 奇异，则它至少有一个特征值为 0。

② 若 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，则它所有的特征值非零。

(8) 特征值与迹的关系：矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值之和等于该矩阵的迹，即 $\sum_{i=1}^{n}\lambda_i=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$。

(9) 与不同特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 对应的非零特征向量 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$ 线性无关。

(10) 特征值与秩的关系：

① 若 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 r 个非零特征值，则 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=r$。

② 若 0 是 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的无多重的特征值，则 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=n-1$。

③ 若 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})\leqslant n-1$，则 λ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值。

(11) 特征值与行列式的关系：矩阵 $\boldsymbol{A}$ 所有特征值的乘积等于该矩阵的行列式，即 $\prod_{i=1}^{n}\lambda_i=\det(\boldsymbol{A})=|\boldsymbol{A}|$。

(12) 一个 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是正定 (或半正定) 的，当且仅当它的特征值是正 (或者非负) 的。

(13) 若 $\boldsymbol{A}$ 的特征值不相同，则一定可以找到一个相似矩阵 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{D}$ (对角矩阵)，其对角元素即是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值。

(14) Cayley-Hamilton 定理：若 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 是 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，则

$$\prod_{i=1}^{n}(\boldsymbol{A}-\lambda_i\boldsymbol{I})=0$$

(15) $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的任何一个特征值 λ 的几何多重度都不可能大于 λ 的代数多重度。

(16) 关于相似矩阵的特征值：

① 若 λ 是 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征值，并且 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 非奇异，则 λ 也是矩阵 $\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}$ 的一个特征值，但对应的特征向量一般不相同。

② 若 λ 是 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征值，并且 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是酉矩阵，则 λ 也是矩阵 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}$ 的一个特征值，但对应的特征向量一般不相同。

③ 若 λ 是 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征值，并且 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是正交矩阵，则 λ 也是矩阵 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}$ 的一个特征值，但对应的特征向量一般不相同。

(17) 一个 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}=[a_{ij}]$ 的最大特征值以该矩阵的列元素之和的最大值为界，即 $\lambda_{\max}\leqslant\max\limits_{i}\sum_{j=1}^{n}a_{ij}$。

(18) 随机向量 $\boldsymbol{x}(t)=[x_1(t),x_2(t),\cdots,x_n(t)]^{\mathrm{T}}$ 的相关矩阵 $\boldsymbol{R}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\}$ 的特征值以信号的最大功率 $P_{\max}=\max\limits_{i}\mathrm{E}\{|x_i(t)|^2\}$ 和最小功率 $P_{\min}=\min_i\mathrm{E}\{|x_i(t)|^2\}$ 为界，即有

$$P_{\min}\leqslant\lambda_i\leqslant P_{\max}\tag{8.2.26}$$

(19) 随机向量 $\boldsymbol{x}(t)$ 的相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的特征值散布 (eigenvalue spread) 为

$$\mathcal{X}(\boldsymbol{R})=\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}} \tag{8.2.27}$$

(20) 关于绝对值小于 1 的特征值：

① 若 $|\lambda_i|<1,\ i=1,2,\cdots,n$，则矩阵 $\boldsymbol{A}\pm\boldsymbol{I}_n$ 非奇异。

② $|\lambda_i|<1,\ i=1,2,\cdots,n \Longleftrightarrow \det(\boldsymbol{A}-z\boldsymbol{I}_n)=0$ 的根不可能位于单位圆上或单位圆外。

(21) 关于 $m\times n\ (n\geqslant m)$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $n\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 乘积的特征值：

① 若 λ 是矩阵乘积 $\boldsymbol{AB}$ 的特征值，则 λ 也是 $\boldsymbol{BA}$ 的特征值。

② 若 $\lambda\neq 0$ 是矩阵乘积 $\boldsymbol{BA}$ 的特征值，则 λ 也是 $\boldsymbol{AB}$ 的特征值。

③ 若 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_m$ 是矩阵乘积 $\boldsymbol{AB}$ 的特征值，则矩阵乘积 $\boldsymbol{BA}$ 的 n 个特征值为 $\lambda_1,\cdots,\lambda_m,0,\cdots,0$。

(22) 若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 λ，则矩阵多项式 $f(\boldsymbol{A})=\boldsymbol{A}^n+c_1\boldsymbol{A}^{n-1}+\cdots+c_{n-1}\boldsymbol{A}+c_n\boldsymbol{I}$ 的特征值为

$$f(\lambda)=\lambda^n+c_1\lambda^{n-1}+\cdots+c_{n-1}\lambda+c_n \tag{8.2.28}$$

(23) 若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 λ，则矩阵指数函数 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$ 的特征值为 e^{λ}。

性质 (13) 给出了求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值的相似变换方法。此时，通常选择相似变换矩阵 $\boldsymbol{S}$ 为正交矩阵。

下面概括了特征值 λ 与特征向量 $\boldsymbol{u}$ 组成的特征对 $(\lambda,\boldsymbol{u})$ 具有的性质 [224]。

(1) 若 $(\lambda,\boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，则 $(c\lambda,\boldsymbol{u})$ 是矩阵 $c\boldsymbol{A}$ 的特征对，其中，c 为非零的常数。

(2) 若 $(\lambda,\boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，则 $(\lambda,c\boldsymbol{u})$ 也是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征对，其中，c 为非零的常数。

(3) 若 $(\lambda_i,\boldsymbol{u}_i)$ 和 $(\lambda_j,\boldsymbol{u}_j)$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，并且 $\lambda_i\neq\lambda_j$，则特征向量 $\boldsymbol{u}_i$ 与 $\boldsymbol{u}_j$ 线性无关。

(4) Hermitian 矩阵与不同特征值对应的特征向量相互正交，即对于 $\lambda_i\neq\lambda_j$，有 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_j=0$。

(5) 若 λ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，向量 $\boldsymbol{u}_1$ 和 $\boldsymbol{u}_2$ 分别是与 λ 对应的特征向量，则 $c_1\boldsymbol{u}_1+c_2\boldsymbol{u}_2$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ 对应的特征向量，其中，c_1 和 c_2 为常数，并且至少有一个不等于 0。

(6) 若 $(\lambda,\boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，并且 $\alpha_0,\alpha_1,\cdots,\alpha_p$ 为复常数，则 $f(\lambda)=\alpha_0+\alpha_1\lambda+\cdots+\alpha_p\lambda^p$ 是矩阵多项式 $f(\boldsymbol{A})=\alpha_0\boldsymbol{I}+\alpha_1\boldsymbol{A}+\cdots+\alpha_p\boldsymbol{A}^p$ 的特征值，与之对应的特征向量仍然为 $\boldsymbol{u}$。

(7) 若 $(\lambda,\boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，则 $(\lambda^k,\boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}^k$ 的特征对。

(8) 若 $(\lambda, \boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对，则 $(\mathrm{e}^{\lambda}, \boldsymbol{u})$ 是矩阵指数函数 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}}$ 的特征对。

(9) 若 $\lambda(A)$ 和 $\lambda(B)$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的特征值，而 $\boldsymbol{u}(A)$ 和 $\boldsymbol{u}(B)$ 分别是与特征值 $\lambda(A)$ 和 $\lambda(B)$ 对应的特征向量，则

① $\lambda(A)\lambda(B)$ 是矩阵 Kronecker 积 $\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B}$ 的特征值，并且 $\boldsymbol{u}(A) \otimes \boldsymbol{u}(B)$ 是与特征值 $\lambda(A)\lambda(B)$ 对应的特征向量。

② $\lambda(A)$ 和 $\lambda(B)$ 分别是矩阵直和 $\boldsymbol{A} \oplus \boldsymbol{B}$ 的特征值，与它们对应的特征向量分别为 $\begin{bmatrix} \boldsymbol{u}(A) \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix} \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{u}(B) \end{bmatrix}$。

(10) 若 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 n 个线性无关的向量，则 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{-1} \tag{8.2.29}$$

式中，$n \times n$ 特征矩阵 (eigen matrix) $\boldsymbol{U}$ 由矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个特征向量组成，$n \times n$ 对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的元素为 $\boldsymbol{A}$ 的特征值。

(11) 令 $\boldsymbol{B}$ 是一个秩等于 1 的 $n \times n$ 矩阵，其特征值为 λ，特征向量为 $\boldsymbol{u}_1$，则

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{B} + \alpha \boldsymbol{I})^{-1} &= \frac{1}{\alpha + \lambda}\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}} + \frac{1}{\alpha}\boldsymbol{I} - \frac{1}{\alpha}\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}} \\ &= \frac{1}{\alpha}\boldsymbol{I} - \frac{\lambda}{\alpha(\alpha + \lambda)}\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\end{aligned} \tag{8.2.30}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值问题往往转化为相应矩阵的特征值问题求解。实现这一转化有两种主要方法：

方法 1　矩阵 $\boldsymbol{A}_{m \times n}$ 的非零奇异值是 $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 或者 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 的非零特征值 λ_i 的正平方根，并且 $\boldsymbol{A}$ 与 σ_i 对应的左奇异向量 $\boldsymbol{u}_j$ 和右奇异向量 $\boldsymbol{v}_i$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}$ 与非零特征值 λ_i 对应的特征向量。

方法 2　矩阵 $\boldsymbol{A}_{m \times n}$ 的奇异值分解转化为 $(m + n) \times (m + n)$ 增广矩阵

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \tag{8.2.31}$$

的特征值分解。

定理 8.2.1 (Jordan-Wielandt 定理)[431, Theorem I.4.2]　若 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_{p-1} \geqslant \sigma_p$ 是 $\boldsymbol{A}_{m \times n}$ 的奇异值 (其中，$p = \min\{m, n\}$)，则上述增广矩阵具有特征值

$$-\sigma_1, \cdots, -\sigma_p, \underbrace{0, \cdots, 0}_{|m-n|\text{个}}, \sigma_p, \cdots, \sigma_1$$

与 $\pm\sigma_j$ 相对应的特征向量为

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_j \\ \pm\boldsymbol{v}_j \end{bmatrix}, \quad j = 1, 2, \cdots, p$$

若 $m \neq n$，则另有特征向量

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_j \\ \boldsymbol{0} \end{bmatrix}, \quad n + 1 \leqslant j \leqslant m \qquad \text{或} \qquad \begin{bmatrix} \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{v}_j \end{bmatrix}, \quad m + 1 \leqslant j \leqslant n$$

分别取决于 $m > n$ 或者 $m < n$。

定理 8.2.1 启迪了使用增广矩阵的特征值分解计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解的一类方法。例如，通过对 Jacobi-Davidson 算法加以推广，Hochstenbach 于 2001 年提出了 Jacobi-Davidson 型奇异值分解算法 [221]。

关于矩阵之和 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}$ 的特征值，有下面的结果。

定理 8.2.2 (Weyl 定理)[270] 设 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}\in C^{n\times n}$ 是 Hermitian 矩阵，且特征值按照递增顺序排列：

$$\lambda_1(\boldsymbol{A}) \leqslant \lambda_2(\boldsymbol{A}) \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n(\boldsymbol{A})$$
$$\lambda_1(\boldsymbol{B}) \leqslant \lambda_2(\boldsymbol{B}) \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n(\boldsymbol{B})$$
$$\lambda_1(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \lambda_2(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \cdots \leqslant \lambda_n(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})$$

则

$$\lambda_i(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \geqslant \begin{cases} \lambda_i(\boldsymbol{A})+\lambda_1(\boldsymbol{B}) \\ \lambda_{i-1}(\boldsymbol{A})+\lambda_2(\boldsymbol{B}) \\ \cdots \\ \lambda_1(\boldsymbol{A})+\lambda_i(\boldsymbol{B}) \end{cases} \tag{8.2.32}$$

和

$$\lambda_i(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \leqslant \begin{cases} \lambda_i(\boldsymbol{A})+\lambda_n(\boldsymbol{B}) \\ \lambda_{i+1}(\boldsymbol{A})+\lambda_{n-1}(\boldsymbol{B}) \\ \cdots \\ \lambda_n(\boldsymbol{A})+\lambda_i(\boldsymbol{B}) \end{cases} \tag{8.2.33}$$

式中，$i=1,2,\cdots,n$。

特别地，当 $\boldsymbol{A}$ 为实对称矩阵，并且 $\boldsymbol{B}=a\boldsymbol{z}\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}$，则有下面的交织特征值定理 (interlacing eigenvalue theorem) [184, Theorem 8.1.8]。

定理 8.2.3 令 $\boldsymbol{A}\in R^{n\times n}$ 是一对称矩阵，其特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 满足

$$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \tag{8.2.34}$$

并令 $\boldsymbol{z}\in R^n$ 是一向量，其范数 $\|\boldsymbol{z}\|=1$。假定 a 为一实数，并且矩阵 $\boldsymbol{A}+a\boldsymbol{z}\boldsymbol{z}^{\mathrm{T}}$ 的特征值

$$\xi_1 \geqslant \xi_2 \geqslant \cdots \geqslant \xi_n \tag{8.2.35}$$

则

$$\xi_1 \geqslant \lambda_1 \geqslant \xi_2 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \xi_n \geqslant \lambda_n, \quad 若\, a>0 \tag{8.2.36}$$

或者

$$\lambda_1 \geqslant \xi_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \xi_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n \geqslant \xi_n, \quad 若\, a<0 \tag{8.2.37}$$

并且无论 $a>0$ 还是 $a<0$，均有

$$\sum_{i=1}^{n} \xi_i - \lambda_i = a \tag{8.2.38}$$

8.2.5 矩阵的可对角化定理

一个矩阵的规范化表示称为该矩阵的范式。现在考虑使用特征值和特征向量表示的矩阵范式。为此，先分析矩阵的秩与多重特征值之间的重要关系。

引理 8.2.4 若 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 r_A，并且具有 z_A 个零特征值，则

$$r_A \geqslant n - z_A \tag{8.2.39}$$

即非零特征值的个数不会超过矩阵的秩。

引理 8.2.5 若 λ_k 是 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的多重特征值，并且其多重度为 m_k，则

$$\text{rank}(\boldsymbol{A} - \lambda_k \boldsymbol{I}) \geqslant n - m_k \tag{8.2.40}$$

以上两个引理的证明可参考文献 [411, p.306]。

下面考虑如何对一个正方矩阵进行相似变换，将它变成对角矩阵。

如前所述，任意正方矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的每一个特征值 λ_i 都有一个相对应的特征向量 $\boldsymbol{u}_i$ 满足

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{8.2.41}$$

这一方程组也可合写为

$$\boldsymbol{A}[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n] = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n] \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix} \tag{8.2.42}$$

定义矩阵

$$\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n] \tag{8.2.43}$$

$$\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n) \tag{8.2.44}$$

则式 (8.2.42) 可以简写作

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma} \tag{8.2.45}$$

若矩阵 $\boldsymbol{U}$ 非奇异，则有

$$\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n) \tag{8.2.46}$$

通过相似变换得到的对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 在相似下的范式 (canonical form under similarity) 或简称为相似范式 (similar canonical form) [411, p.283]。

定义 8.2.4 一个 $n \times n$ 实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 若与一个对角矩阵相似，则称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是可对角化的 (diagonalizable)。

下面讨论可对角化矩阵的某些特征。

定理 8.2.4 一个 $n \times n$ 实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是可对角化的，当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 具有 n 个线性无关的特征向量。

证明　(1) 充分条件的证明：假设 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个线性无关的特征向量，即有 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i, i = 1, 2, \cdots, n$。令矩阵 $\boldsymbol{S} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n]$ 由特征向量 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n$ 组成。由于这些特征向量相互线性无关，矩阵 $\boldsymbol{S}$ 为非奇异矩阵，其逆矩阵 $\boldsymbol{S}^{-1}$ 存在。根据逆矩阵的定义知 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{S} = [\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{u}_n] = \boldsymbol{I}$。另一方面，由 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i$ 易知

$$\boldsymbol{AS} = [\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_n] = [\lambda_1 \boldsymbol{u}_1, \lambda_2 \boldsymbol{u}_2, \cdots, \lambda_n \boldsymbol{u}_n]$$

上式左乘逆矩阵 $\boldsymbol{S}^{-1}$，则有

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{AS} &= [\lambda_1 \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{u}_1, \lambda_2 \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{u}_2, \cdots, \lambda_n \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{u}_n] \\
&= \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix} [\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{u}_n] \\
&= \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix} \boldsymbol{I} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix}
\end{aligned}$$

即充分性得证。

(2) 必要条件的证明：令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与对角矩阵 $\boldsymbol{D}$ 相似，即 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{AS} = \boldsymbol{D}$。由此得 $\boldsymbol{AS} = \boldsymbol{SD}$。记 $\boldsymbol{S} = [\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{s}_2, \cdots, \boldsymbol{s}_n]$，$\boldsymbol{D} = \text{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_n)$，则 $\boldsymbol{AS} = \boldsymbol{SD}$ 可以写作

$$[\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_1, \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_2, \cdots, \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_n] = [d_1 \boldsymbol{s}_1, d_2 \boldsymbol{s}_2, \cdots, d_n \boldsymbol{s}_n]$$

立即有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}_i = d_i \boldsymbol{s}_i, \qquad i = 1, 2, \cdots, n$$

这说明矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的列向量 $\boldsymbol{s}_i$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量 $\boldsymbol{u}_i$，即 $\boldsymbol{s}_i = \boldsymbol{u}_i, i = 1, 2, \cdots, n$。但是，由于矩阵 $\boldsymbol{S}$ 非奇异，所以其所有列向量线性无关，从而知 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n$ 线性无关。这就证明了必要条件。 ■

由于一个 $n \times n$ 矩阵有 n 个不同的特征值时，它的 n 个特征向量线性无关，所以定理 8.2.4 给出下面的推论。

推论 8.2.2　若 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有 n 个不同的特征值，则 $\boldsymbol{A}$ 是可对角化的。

更一般地，即使矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有多重根，它仍然有可能是可对角化的，因为 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个特征向量有可能是线性无关的。下面的定理给出了矩阵的所有特征向量线性无关的充分必要条件，从而也是一个矩阵可对角化的充分必要条件。这一定理常被称为可对角化定理 (diagonability theorem)。

定理 8.2.5　若矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{n \times n}$ 的特征值 λ_k 具有多重度 $m_k, k = 1, 2, \cdots, p$，并且 $\sum_{k=1}^{p} m_k = n$，则矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有 n 个线性无关的特征向量，当且仅当 $\text{rank}(\boldsymbol{A} - \lambda_k \boldsymbol{I}) =$

$n - m_k, k = 1,2,\cdots,p$。此时，$\boldsymbol{AU} = \boldsymbol{U\Sigma}$ 中的矩阵 $\boldsymbol{U}$ 是非奇异的，而且 $\boldsymbol{A}$ 可对角化为 $\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{AU} = \boldsymbol{\Sigma}$。

证明 [411, p.307] (1) 充分性：若 $\text{rank}(\boldsymbol{A} - \lambda_k \boldsymbol{I}) = n - m_k$，则 $\boldsymbol{U}$ 是非奇异的。其证明如下。

因为 $\text{rank}(\boldsymbol{A} - \lambda_k \boldsymbol{I}) = n - m_k$，所以方程 $(\boldsymbol{A} - \lambda_k \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 恰好有 $n - (n - m_k)$ 个线性无关的非零解。根据定义，这些解是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ_k 对应的特征向量。因此，与每一个 λ_k 相对应的 m_k 个特征向量是线性无关的，它们组成一个线性无关的集合。于是，共有与 p 个多重特征值对应的特征向量集合，每个集合内的特征向量线性无关。

下面用反证法证明不同集合的特征向量也是线性无关的。不失一般性，假定与多重度为 m_1 的特征值 λ_1 对应的特征向量集合为 $\{\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_{m_1}\}$，与多重度为 m_2 的特征值 λ_2 对应的特征向量集合为 $\{\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \cdots, \boldsymbol{z}_{m_2}\}$，并假定 $\boldsymbol{z}_2$ 是第一个集合 $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_{m_1}$ 的线性组合。于是，有 $\boldsymbol{z}_2 = \sum_{i=1}^{m_1} c_i \boldsymbol{y}_i$ (其中，c_i 不全为零)。用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 左乘这一线性关系公式，得 $\boldsymbol{Az}_2 = \sum_{i=1}^{m_1} c_i \boldsymbol{Ay}_i$。由于 $\boldsymbol{z}_2$ 和 $\boldsymbol{y}_i$ 分别是与不同特征值 λ_2 和 λ_1 对应的特征向量，故有 $\boldsymbol{Az}_2 = \lambda_2 \boldsymbol{z}_2$ 和 $\boldsymbol{Ay}_i = \lambda_1 \boldsymbol{y}_i$。将这两个关系代入式 $\boldsymbol{Az}_2 = \sum_{i=1}^{m_1} c_i \boldsymbol{Ay}_i$ 中，立即有

$$\lambda_2 \boldsymbol{z}_2 = \sum_{i=1}^{m_1} c_i \lambda_1 \boldsymbol{y}_i = \lambda_1 \sum_{i=1}^{m_1} c_i \boldsymbol{y}_i = \lambda_1 \boldsymbol{z}_2$$

从而有 $\lambda_2 = \lambda_1$。但是，这一结果与 $\lambda_1 \neq \lambda_2$ 这一假设相矛盾。因此，p 个集合 (每个集合有 m_k 个特征向量) 内的所有 $\sum_{i=1}^{p} m_k = n$ 个特征向量线性无关，即矩阵 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n]$ 非奇异。充分性得证。

(2) 必要性：若 $\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{AU} = \boldsymbol{\Sigma}$ 存在，则 $\text{rank}(\boldsymbol{A} - \lambda_k \boldsymbol{I}) = n - m_k$。其证明如下。

注意到 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是对角矩阵，其对角元素为所有 n 个特征值。因此，对角矩阵 $(\boldsymbol{\Sigma} - \lambda_k \boldsymbol{I})$ 的对角线上只有 m_k 个零元素，即 $\text{rank}(\boldsymbol{\Sigma} - \lambda_k \boldsymbol{I}) = n - m_k$。另由假设 $\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{AU} = \boldsymbol{\Sigma}$ 得 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma U}^{-1}$。于是，有 $(\boldsymbol{A} - \lambda_k \boldsymbol{I}) = (\boldsymbol{U\Sigma U}^{-1} - \lambda_k \boldsymbol{I}) = \boldsymbol{U}(\boldsymbol{\Sigma} - \lambda_k \boldsymbol{I})\boldsymbol{U}^{-1}$。由于与非奇异矩阵 $\boldsymbol{U}$ 相乘，不改变矩阵的秩，故有 $\text{rank}(\boldsymbol{A} - \lambda_k \boldsymbol{I}) = \text{rank}(\boldsymbol{\Sigma} - \lambda_k \boldsymbol{I}) = n - m_k$。 ■

这里举出一个例子，用以说明定理 8.2.5 的应用。

例 8.2.3 考虑矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$$

假定存在一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{T}$ 能够使 $\boldsymbol{A}$ 对角化，即

$$\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{AT} = \begin{bmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{bmatrix}$$

则 $\boldsymbol{T}$ 的列向量必须是 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量。由矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征方程

$$\begin{vmatrix} 1-\lambda & 1 \\ 0 & 1-\lambda \end{vmatrix} = (1-\lambda)^2 = 0$$

得 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\lambda_1=\lambda_2=1$，为二重特征值。令特征向量为 $\boldsymbol{u}=[u_1,u_2]^{\mathrm{T}}$，则由 $\boldsymbol{Au}=\lambda\boldsymbol{u}$ 及 $\lambda=1$，可列出方程组

$$u_1+u_2=u_1$$

$$u_2=u_2$$

解之，得 $u_2=0$，u_1 任意。换言之，若 $\alpha\neq 0$，则 $\alpha\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix}$ 都是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量，即 $\boldsymbol{A}$ 的任何两个特征向量都是线性相关的。这意味着，矩阵 $\boldsymbol{T}$ 必定是奇异矩阵。因此，不可能通过 $\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{AT}$ 将例中的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对角化。事实上，对于特征值 $\lambda=1$ 而言，其多重度 $m_1=2$。因此，根据定理 8.2.5 知，只有当 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})=n-m_1=2-2=0$ 时，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是可对角化的。然而，现在由于

$$\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I}=\begin{bmatrix}1&1\\0&1\end{bmatrix}-\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}0&1\\0&0\end{bmatrix}$$

其秩等于 1，与定理 8.2.5 的条件直接相矛盾，所以检验定理 8.2.5 的条件直接知，本例的矩阵不可对角化。

8.3 Cayley-Hamilton 定理及其应用

如上节所述，一个 $n\times n$ 一般矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值由特征多项式 $\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})$ 决定。不仅如此，特征多项式还与矩阵的求逆、矩阵幂和矩阵指数函数的计算密切相关，所以有必要对特征多项式作更深入的讨论与分析。

8.3.1 Cayley-Hamilton 定理

Cayley-Hamilton 定理是关于一般矩阵的特征多项式的重要结果。从这一定理出发，很容易解决矩阵的求逆、矩阵幂和矩阵指数函数的计算等问题。为了引出 Cayley-Hamilton 定理，先介绍几个与多项式有关的重要概念。

当 $p_n\neq 0$ 时，n 称为多项式 $p(x)=p_nx^n+p_{n-1}x^{n-1}+\cdots+p_1x+p_0$ 的阶数。一个 n 阶多项式称为首一多项式 (monic polynomial)，若 x^n 的系数等于 1。

若 $p(\boldsymbol{A})=p_n\boldsymbol{A}^n+p_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-1}+\cdots+p_1\boldsymbol{A}+p_0\boldsymbol{I}=\boldsymbol{O}$，则称 $p(x)=p_nx^n+p_{n-1}x^{n-1}+\cdots+p_1x+p_0$ 是使矩阵 $\boldsymbol{A}$ 零化的多项式，简称零化多项式 (annihilating polynomial)。

对于一个 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$，令 m 是使得幂 $\boldsymbol{I},\boldsymbol{A},\cdots,\boldsymbol{A}^m$ 线性相关的最小整数。于是，有方程式

$$p_m\boldsymbol{A}^m+p_{m-1}\boldsymbol{A}^{m-1}+\cdots+p_1\boldsymbol{A}+p_0\boldsymbol{I}=\boldsymbol{O}_{n\times n}\tag{8.3.1}$$

式中，$\boldsymbol{A}^m$ 的系数不为零。多项式 $p(x)=p_mx^m+p_{m-1}x^{m-1}+\cdots+p_1x+p_0$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小多项式。

下面的定理表明，特征多项式 $p(x)=\det(\boldsymbol{A}-x\boldsymbol{I})$ 是使矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 零化的多项式。

定理 8.3.1 (Cayley-Hamilton 定理) 每一个正方矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 都满足其特征方程，即若特征多项式具有式 (8.1.7) 的形式，则

$$p_n\boldsymbol{A}^n + p_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-1} + \cdots + p_1\boldsymbol{A} + p_0\boldsymbol{I} = \boldsymbol{O} \tag{8.3.2}$$

式中，$\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{O}$ 分别为 $n\times n$ 单位矩阵和零矩阵。

证明 逆矩阵的定义公式 $\boldsymbol{B}^{-1} = \frac{1}{\det(\boldsymbol{B})}\mathrm{adj}(\boldsymbol{B})$ 可以等价写作 $\boldsymbol{B}\mathrm{adj}(\boldsymbol{B}) = \det(\boldsymbol{B})\boldsymbol{I}_n$，故有

$$(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I})\mathrm{adj}(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I}) = \det(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I})\boldsymbol{I}$$

将 $p(x) = \det(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I}) = p_nx^n + p_{n-1}x^{n-1} + \cdots + p_1x + p_0$ 代入上式，便有

$$(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I})\mathrm{adj}(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I}) = (p_nx^n + p_{n-1}x^{n-1} + \cdots + p_1x + p_0)\boldsymbol{I} \tag{1}$$

上式表明，伴随矩阵 $\mathrm{adj}(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I})$ 必然是一个关于 x 的 $n-1$ 次矩阵多项式，不妨令其为

$$\mathrm{adj}(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I}) = x^{n-1}\boldsymbol{B}_{n-1} + x^{n-2}\boldsymbol{B}_{n-2} + \cdots + x\boldsymbol{B}_1 + \boldsymbol{B}_0 \tag{2}$$

式中，$\boldsymbol{B}_{n-1}, \boldsymbol{B}_{n-2}, \cdots, \boldsymbol{B}_1$ 均为 $n\times n$ 常数矩阵。将式 (2) 代入式 (1)，得

$$\begin{aligned}&(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I})(x^{n-1}\boldsymbol{B}_{n-1} + x^{n-2}\boldsymbol{B}_{n-2} + \cdots + x\boldsymbol{B}_1 + \boldsymbol{B}_0)\\ &= (p_nx^n + p_{n-1}x^{n-1} + \cdots + p_1x + p_0)\boldsymbol{I}\end{aligned}$$

比较上式两边同幂次项 x^k 的系数，即可得到 $n+1$ 个方程：

$$\begin{aligned}-\boldsymbol{B}_{n-1} &= p_n\boldsymbol{I}\\ -B_{n-2} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_{n-1} &= p_{n-1}\boldsymbol{I}\\ &\cdots\\ -\boldsymbol{B}_0 + \boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_1 &= p_1\boldsymbol{I}\\ -\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}_0 &= p_0\boldsymbol{I}\end{aligned}$$

在上述前 n 个方程中，两边分别左乘矩阵 $\boldsymbol{A}^n, \boldsymbol{A}^{n-1}, \cdots, \boldsymbol{A}$，然后将所有 $n+1$ 个方程相加，立即有 $\boldsymbol{O} = p_n\boldsymbol{A}^n + p_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-2} + \cdots + p_1\boldsymbol{A} + p_0\boldsymbol{I}$，这正是所期望的结果。 ■

以上证明是大多数文献采用的传统证明方法。最近，Jain 与 Gunawardena 从矩阵分解的角度，给出了另外一种证明。对此证明感兴趣的读者可参考文献 [236, p.180]。

Cayley-Hamilton 定理有很多非常有趣和重要的应用。例如，利用 Cayley-Hamilton 定理，也能够直接证明两个相似矩阵具有相同的特征值。

考查两个相似矩阵的特征多项式。令 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的相似矩阵，并且已知矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式 $p(\boldsymbol{x}) = \det(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I}) = p_nx^n + p_{n-1}x^{n-1} + \cdots + p_1x + p_0$。根据 Cayley-Hamilton 定理知 $p(\boldsymbol{A}) = p_n\boldsymbol{A}^n + p_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-1} + \cdots + p_1\boldsymbol{A} + p_0\boldsymbol{I} = \boldsymbol{O}$。

对于相似矩阵 $\boldsymbol{B}$，由于

$$\boldsymbol{B}^k = (\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S})(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S})\cdots(\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}) = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{S}$$

故有

$$\begin{aligned}p(\boldsymbol{B}) &= p_n\boldsymbol{B}^n + p_{n-1}\boldsymbol{B}^{n-1} + \cdots + p_1\boldsymbol{B} + p_0\boldsymbol{I} \\ &= p_n\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}^n\boldsymbol{S} + p_{n-1}\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}^{n-1}\boldsymbol{S} + \cdots + p_1\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S} + p_0\boldsymbol{I} \\ &= \boldsymbol{S}^{-1}\left(p_n\boldsymbol{A}^n + p_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-1} + \cdots + p_1\boldsymbol{A} + p_0\boldsymbol{I}\right)\boldsymbol{S} \\ &= \boldsymbol{S}^{-1}p(\boldsymbol{A})\boldsymbol{S} \\ &= \boldsymbol{O}\end{aligned}$$

在得到最后一个式子时，代入了 Cayley-Hamilton 定理的结果 $p(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{O}$。换言之，两个相似矩阵具有相同的特征多项式，从而它们具有相同的特征值。

下面再介绍 Cayley-Hamilton 定理的几个重要应用。

8.3.2 逆矩阵和广义逆矩阵的计算

若矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 非奇异，则用 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 右乘 (或左乘) 式 (8.3.2) 两边，立即有

$$p_n\boldsymbol{A}^{n-1} + p_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-2} + \cdots + p_2\boldsymbol{A} + p_1\boldsymbol{I} + p_0\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{O}$$

由此即可得到逆矩阵的计算公式

$$\boldsymbol{A}^{-1} = -\frac{1}{p_0}(p_n\boldsymbol{A}^{n-1} + p_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-2} + \cdots + p_2\boldsymbol{A} + p_1\boldsymbol{I}) \tag{8.3.3}$$

例 8.3.1 已知矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix}1 & 5\\ 4 & 6\end{bmatrix}$$

其特征多项式为

$$\det(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I}) = \begin{vmatrix}1-x & 5\\ 4 & 6-x\end{vmatrix} = (1-x)(6-x) - 5\times 4 = x^2 - 7x - 14$$

即 $p_0 = -14$, $p_1 = -7$, $p_2 = 1$。将这些值代入式 (8.3.3)，立即得

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \frac{1}{14}(\boldsymbol{A} - 7\boldsymbol{I}) = \frac{1}{14}\left(\begin{bmatrix}1 & 5\\ 4 & 6\end{bmatrix} - 7\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\right) = \begin{bmatrix}-\frac{3}{7} & \frac{5}{14}\\ \frac{2}{7} & -\frac{1}{14}\end{bmatrix}$$

例 8.3.2 由矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix}2 & 0 & 1\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 3\end{bmatrix}$$

得矩阵的二次幂

$$\boldsymbol{A}^2 = \begin{bmatrix}2 & 0 & 1\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 3\end{bmatrix}\begin{bmatrix}2 & 0 & 1\\ 0 & 2 & 0\\ 0 & 0 & 3\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}4 & 0 & 5\\ 0 & 4 & 0\\ 0 & 0 & 9\end{bmatrix}$$

和特征多项式

$$\det(\boldsymbol{A}-x\boldsymbol{I})=\begin{vmatrix}2-x & 0 & 1\\ 0 & 2-x & 0\\ 0 & 0 & 3-x\end{vmatrix}=(2-x)^2(3-x)$$
$$=-x^3+7x^2-16x+12$$

即 $p_0=12$, $p_1=-16$, $p_2=7$, $p_3=-1$。将这些值连同矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{A}^2$ 一起代入矩阵求逆公式 (8.3.3)，则有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^{-1}&=-\frac{1}{12}\left(-\boldsymbol{A}^2+7\boldsymbol{A}-16\boldsymbol{I}\right)\\&=-\frac{1}{12}\left(-\begin{bmatrix}4&0&5\\0&4&0\\0&0&9\end{bmatrix}+7\begin{bmatrix}2&0&1\\0&2&0\\0&0&3\end{bmatrix}-16\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\right)\\&=\frac{1}{6}\begin{bmatrix}3&0&-1\\0&3&0\\0&0&2\end{bmatrix}\end{aligned}$$

Cayley-Hamilton 定理还可以用于求任意一个复矩阵的广义逆矩阵。这一结果是 Decell 于 1965 年得到的 [116]。

定理 8.3.2 令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是任意一个 $m\times n$ 矩阵，并且令

$$f(\lambda)=(-1)^m(a_0\lambda^m+a_1\lambda^{m-1}+\cdots+a_{m-1}\lambda+a_m),\quad a_0=1 \tag{8.3.4}$$

是矩阵乘积 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的特征多项式 $(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}-\lambda\boldsymbol{I})$。若 k 是满足 $a_k\neq 0$ 的最大整数，则 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵由

$$\boldsymbol{A}^{\dagger}=-a_k^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\left[(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{k-1}+a_1(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{k-2}+\cdots+a_{k-2}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})+a_{k-1}\boldsymbol{I}\right] \tag{8.3.5}$$

确定。当 $k=0$ 是使 $a_k\neq 0$ 的最大整数时，广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}=\boldsymbol{O}$。

证明 参见文献 [116]。

在有些文献 (例如文献 [425]) 中，称上述定理为 Decell 定理。注意，Decell 定理中的整数 k 就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩，即 $k=\mathrm{rang}(\boldsymbol{A})$。

根据上述定理，Decell 提出了计算 Moore-Penrose 逆矩阵的下列方法 [116]。

(1) 构造矩阵序列 $\boldsymbol{A}_0,\boldsymbol{A}_1,\cdots,\boldsymbol{A}_k$

$$\begin{array}{lll}\boldsymbol{A}_0=\boldsymbol{O}, & -1=q_0, & \boldsymbol{B}_0=\boldsymbol{I};\\ \boldsymbol{A}_1=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}, & \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}_1)=q_1, & \boldsymbol{B}_1=\boldsymbol{A}_1-q_1\boldsymbol{I};\\ \boldsymbol{A}_2=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_1, & \dfrac{\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}_2)}{2}=q_2, & \boldsymbol{B}_2=\boldsymbol{A}_2-q_2\boldsymbol{I};\\ \cdots & \cdots & \cdots\\ \boldsymbol{A}_{k-1}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_{k-2}, & \dfrac{\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}_{k-1})}{k-1}=q_{k-1}, & \boldsymbol{B}_{k-1}=\boldsymbol{A}_{k-1}-q_{k-1}\boldsymbol{I};\\ \boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_{k-1}, & \dfrac{\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}_k)}{k}=q_k, & \boldsymbol{B}_k=\boldsymbol{A}_k-q_k\boldsymbol{I}\end{array}$$

Faddeev 证明了 [149, pp.260~265]，按照以上方法构造的系数 $q_i = -a_i, i = 1, 2, \cdots, k$。

(2) 计算 Moore-Penrose 逆矩阵

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^{\dagger} &= -a_k^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\left[(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{k-1} + a_1(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{k-2} + \cdots + a_{k-2}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})^{k} + a_{k-1}\boldsymbol{I}\right] \\ &= -a_k^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}_{k-1}\end{aligned} \tag{8.3.6}$$

8.3.3 矩阵幂的计算

给定任意一个矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 和一个整数 k，称 $\boldsymbol{A}^k$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 k 次幂。如果 k 比较大，显然矩阵幂 $\boldsymbol{A}^k$ 的计算是一件很繁琐的事。幸运的是，Cayley-Hamilton 定理为这个问题提供了一种简单的解决方法。

考查多项式除法 $f(x)/g(x)$，其中，$g(x) \neq 0$。根据 Euclidean 除法知，存在两个多项式 $q(x)$ 和 $r(x)$，使得

$$f(x) = g(x)q(x) + r(x)$$

式中，$q(x)$ 和 $r(x)$ 分别称为商和余项，并且余项 $r(x)$ 的阶数小于 $g(x)$ 的阶数或 $r(x) = 0$。

令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式为

$$p(x) = p_n x^n + p_{n-1}x^{n-1} + \cdots + p_1 x + p_0$$

则对于任何一个 x，其 K 次幂

$$x^K = p(x)q(x) + r(x) \tag{8.3.7}$$

当 x 是特征方程 $p(x) = 0$ 的一个根时，上式变为

$$x^K = r(x) = r_0 + r_1 x + \cdots + r_{n-1}x^{n-1} \tag{8.3.8}$$

因为 $r(x)$ 的阶数小于 $p(x)$ 的阶数 n。

用 $\boldsymbol{A}$ 代替标量 x，则式 (8.3.7) 变为

$$\boldsymbol{A}^K = p(\boldsymbol{A})q(\boldsymbol{A}) + r(\boldsymbol{A}) \tag{8.3.9}$$

根据 Cayley-Hamilton 定理知，若 $p(x)$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式，则 $p(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{O}$。因此，式 (8.3.9) 简化为

$$\boldsymbol{A}^K = r(\boldsymbol{A}) = r_0\boldsymbol{I} + r_1\boldsymbol{A} + \cdots + r_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-1} \tag{8.3.10}$$

式 (8.3.10) 给出了计算矩阵幂 $\boldsymbol{A}^K$ 的方法。

算法 8.3.1 (矩阵幂的计算)[236, p.172]

步骤 1 构造特征多项式

$$p(x) = \det(\boldsymbol{A} - x\boldsymbol{I}) = p_n x^n + p_{n-1}x^{n-1} + \cdots + p_1 x + p_0 \tag{8.3.11}$$

步骤 2 计算特征方程 $p(x)=0$ 的 n 个特征根即特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$。

步骤 3 将特征值代入式 (8.3.8)，得到一组线性方程：

$$\left.\begin{aligned} r_0+\lambda_1 r_1+\cdots+\lambda_1^{n-1}r_{n-1}&=\lambda_1^K\\ r_0+\lambda_2 r_1+\cdots+\lambda_2^{n-1}r_{n-1}&=\lambda_2^K\\ &\cdots\\ r_0+\lambda_n r_1+\cdots+\lambda_n^{n-1}r_{n-1}&=\lambda_n^K \end{aligned}\right\} \tag{8.3.12}$$

解之，得 $r_0,r_1,\cdots,r_{n-1}$。

步骤 4 计算矩阵幂

$$\boldsymbol{A}^K=r_0\boldsymbol{I}+r_1\boldsymbol{A}+\cdots+r_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-1}$$

下面举例加以说明。

例 8.3.3 已知

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 1/2\\ 2 & 1\end{bmatrix}$$

计算 $\boldsymbol{A}^{731}$。

解 利用式 (8.3.11) 构造特征多项式

$$p(x)=\det(\boldsymbol{A}-x\boldsymbol{I})=\begin{vmatrix}1-x & 1/2\\ 2 & 1-x\end{vmatrix}=x^2-2x$$

令 $p(x)=0$，求出 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\lambda_1=0$ 和 $\lambda_2=2$。

将特征值代入式 (8.3.12) 得线性方程组

$$r_0+0r_1=0^{731}$$

$$r_0+2r_1=2^{731}$$

解之，得 $r_0=0$ 和 $r_1=2^{730}$。

计算矩阵幂，得

$$\boldsymbol{A}^{731}=2^{730}\boldsymbol{A}=2^{730}\begin{bmatrix}1 & 1/2\\ 2 & 1\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}2^{730} & 2^{729}\\ 2^{731} & 2^{730}\end{bmatrix}$$

8.3.4 矩阵指数函数的计算

类似于标量指数函数

$$\mathrm{e}^{at}=1+at+\frac{1}{2!}a^2t^2+\cdots+\frac{1}{k!}a^kt^k+\cdots$$

对一个已知矩阵 $\boldsymbol{A}$，可以定义矩阵指数函数 (matrix exponential function)

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A}t+\frac{1}{2!}\boldsymbol{A}^2t^2+\cdots+\frac{1}{k!}\boldsymbol{A}^kt^k+\cdots \tag{8.3.13}$$

由于

$$\mathrm{e}^{(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})t} = \boldsymbol{I} + (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})t + \frac{(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^2}{2}t^2 + \cdots \tag{8.3.14}$$

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\mathrm{e}^{\boldsymbol{B}t} &= \left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{A}t + \frac{\boldsymbol{A}^2t^2}{2} + \cdots\right)\left(\boldsymbol{I} + \boldsymbol{B}t + \frac{\boldsymbol{B}^2t^2}{2} + \cdots\right) \\ &= \boldsymbol{I} + (\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})t + \frac{\boldsymbol{A}^2t^2}{2} + \boldsymbol{AB}t^2 + \frac{\boldsymbol{B}^2t^2}{2} + \cdots \end{aligned}\tag{8.3.15}$$

两式相减，得

$$\mathrm{e}^{(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})t} - \mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\mathrm{e}^{\boldsymbol{B}t} = (\boldsymbol{BA} - \boldsymbol{AB})\frac{t^2}{2} + \cdots \tag{8.3.16}$$

因此，$\mathrm{e}^{(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})t} = \mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\mathrm{e}^{\boldsymbol{B}t}$ 只对 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$ 成立。

容易看出

$$\mathrm{e}^{\boldsymbol{O}} = \mathrm{e}^{\boldsymbol{O}0} = \boldsymbol{I}, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t} = \boldsymbol{A}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$$

矩阵指数函数可以用来表示一阶微分方程的解。在工程应用中，经常会遇到线性一阶微分方程组

$$\dot{\boldsymbol{x}}(t) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(t), \qquad \boldsymbol{x}(0) = \boldsymbol{x}_0$$

其中，$\boldsymbol{A}$ 为常数矩阵。上述一阶微分方程组的解可以写作 $\boldsymbol{x}(t) = \mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\boldsymbol{x}_0$。因此，线性一阶微分方程组的求解等价于计算矩阵指数函数 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$。

利用 Cayley-Hamilton 定理，可以证明 n 阶线性矩阵微分方程的解的唯一性。

定理 8.3.3 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n \times n$ 常数矩阵，其特征多项式为

$$p(\lambda) = \det(\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}) = \lambda^n + c_{n-1}\lambda^{n-1} + \cdots + c_1\lambda + c_0 \tag{8.3.17}$$

并且 n 阶矩阵微分方程

$$\boldsymbol{\Phi}^{(n)}(t) + c_{n-1}\boldsymbol{\Phi}^{(n-1)}(t) + \cdots + c_1\boldsymbol{\Phi}'(t) + c_0\boldsymbol{\Phi}(t) = \boldsymbol{O} \tag{8.3.18}$$

满足初始条件

$$\boldsymbol{\Phi}(0) = \boldsymbol{I}, \quad \boldsymbol{\Phi}'(0) = \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{\Phi}''(0) = \boldsymbol{A}^2, \quad \cdots, \boldsymbol{\Phi}^{(n-1)} = \boldsymbol{A}^{n-1} \tag{8.3.19}$$

则 $\boldsymbol{\Phi}(t) = \mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$ 是 n 阶矩阵微分方程式 (8.3.18) 的唯一解。

证明 [278] 令 $\boldsymbol{\Phi}_1(t)$ 和 $\boldsymbol{\Phi}_2(t)$ 是 n 阶矩阵微分方程的两个解，并令 $\boldsymbol{\Phi}(t) = \boldsymbol{\Phi}_1(t) - \boldsymbol{\Phi}_2(t)$。由于 $\boldsymbol{\Phi}(t)$ 满足矩阵微分方程式 (8.3.18)，故 $\boldsymbol{\Phi}(t)$ 的每一个元素 $\phi_{ij}(t)$ 都满足标量微分方程

$$\phi_{ij}^{(n)}(t) + c_{n-1}\phi_{ij}^{(n-1)}(t) + \cdots + c_1\phi_{ij}'(t) + c_0\phi_{ij}(t) = 0 \tag{1}$$

又由于解 $\boldsymbol{\Phi}_1(t)$ 和 $\boldsymbol{\Phi}_2(t)$ 都满足初始条件式 (8.3.19)，故有 $\boldsymbol{\Phi}(0) = \boldsymbol{\Phi}'(0) = \cdots = \boldsymbol{\Phi}^{(n-1)}(0) = \boldsymbol{O}$，即 $\boldsymbol{\Phi}(0)$ 的每一个元素都等于零，即有

$$\phi_{ij}(0) = \phi_{ij}'(0) = \cdots = \phi_{ij}^{(n-1)}(0) = 0, \quad \forall\, i,j \tag{2}$$

求解具有初始条件式 (2) 的标量微分方程式 (1)，得 $\phi_{ij}(t)=0, \forall\, t\in R,\ i,j=1,2,\cdots,n$。因此，$\boldsymbol{\Phi}(t)\equiv \boldsymbol{O}, \forall\, t\in R$，即 $\boldsymbol{\Phi}_1(t)=\boldsymbol{\Phi}_2(t)$。

现在令 $\boldsymbol{A}$ 为一 $n\times n$ 常数矩阵，具有特征多项式

$$p(\lambda)=\det(\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=\lambda^n+c_{n-1}\lambda^{n-1}+\cdots+c_1\lambda+c_0$$

若 $\boldsymbol{\Phi}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$，则

$$\boldsymbol{\Phi}'(t)=\boldsymbol{A}\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t},\quad \boldsymbol{\Phi}''(t)=\boldsymbol{A}^2\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t},\cdots,\boldsymbol{\Phi}^{(n)}(t)=\boldsymbol{A}^n\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t} \tag{3}$$

于是，由 Cayley-Hamilton 定理知

$$\begin{aligned}&\boldsymbol{\Phi}^{(n)}(t)+c_{n-1}\boldsymbol{\Phi}^{(n-1)}(t)+\cdots+c_1\boldsymbol{\Phi}'(t)+c_0\boldsymbol{\Phi}(t)\\&=(\boldsymbol{A}^n+c_{n-1}\boldsymbol{A}^{n-1}+\cdots+c_1\boldsymbol{A}+c_0\boldsymbol{I})\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=p(\boldsymbol{A})\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}\\&=\boldsymbol{O}\end{aligned}$$

这恰好是矩阵微分方程式 (8.3.18)。又由式 (3) 有

$$\boldsymbol{\Phi}(0)=\boldsymbol{I},\ \boldsymbol{\Phi}'(0)=\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{\Phi}''(0)=\boldsymbol{A}^2,\ \cdots,\ \boldsymbol{\Phi}^{(n-1)}(0)=\boldsymbol{A}^{n-1}$$

此式即是初始条件式 (8.3.19)。因此，$\boldsymbol{\Phi}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$ 是满足具有初始条件式 (8.3.19) 的矩阵微分方程式 (8.3.18) 的解。 ■

定理 8.3.3 保证了矩阵微分方程的唯一解的存在性。下面的定理给出了求这一唯一解的方法。

定理 8.3.4 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 常数矩阵，其特征多项式为

$$p(\lambda)=\det(\lambda \boldsymbol{I}-\boldsymbol{A})=\lambda^n+c_{n-1}\lambda^{n-1}+\cdots+c_1\lambda+c_0$$

则满足初始条件式 (8.3.19) 的矩阵微分方程式 (8.3.18) 的解由

$$\boldsymbol{\Phi}(t)=\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}=x_1(t)\boldsymbol{I}+x_2(t)\boldsymbol{A}+x_3(t)\boldsymbol{A}^2+\cdots+x_n(t)\boldsymbol{A}^{n-1} \tag{8.3.20}$$

给出，式中，$x_k(t)$ 是 n 阶标量微分方程

$$x^{(n)}(t)+c_{n-1}x^{(n-1)}(t)+\cdots+c_1x'(t)+c_0x(t)=0 \tag{8.3.21}$$

满足初始条件

$$\left.\begin{aligned}x_1(0)&=1\\x_1'(0)&=0\\&\cdots\\x_1^{(n-1)}(0)&=0\end{aligned}\right\},\quad \left.\begin{aligned}x_2(0)&=0\\x_2'(0)&=1\\&\cdots\\x_2^{(n-1)}(0)&=0\end{aligned}\right\},\quad\cdots,\quad \left.\begin{aligned}x_n(0)&=0\\x_n'(0)&=0\\&\cdots\\x_n^{(n-1)}(0)&=1\end{aligned}\right\}$$

的解。

证明 [278] 令 $x_1(t), x_2(t), \cdots, x_n(t)$ 是 n 阶标量微分方程 (8.3.21) 满足定理初始条件的唯一一组解，并令

$$\boldsymbol{\Phi}(t) = x_1(t)\boldsymbol{I} + x_2(t)\boldsymbol{A} + x_3\boldsymbol{A}^2 + \cdots + x_n(t)\boldsymbol{A}^{n-1} \tag{1}$$

则

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{\Phi}^{(n)}(t) + c_{n-1}\boldsymbol{\Phi}^{(n-1)}(t) + \cdots + c_1\boldsymbol{\Phi}'(t) + c_0\boldsymbol{\Phi}(t) \\
=&[x_1^{(n)}(t) + c_{n-1}x_1^{(n-1)}(t) + \cdots + c_1x_1'(t) + c_0x_1(t)]\boldsymbol{I} + \\
&[x_2^{(n)}(t) + c_{n-1}x_2^{(n-1)}(t) + \cdots + c_1x_2'(t) + c_0x_2(t)]\boldsymbol{A} + \cdots + \\
&[x_n^{(n)}(t) + c_{n-1}x_n^{(n-1)}(t) + \cdots + c_1x_n'(t) + c_0x_n(t)]\boldsymbol{A}^{n-1} \\
=&0\boldsymbol{I} + 0\boldsymbol{A} + \cdots + 0\boldsymbol{A}^{n-1}
\end{aligned}$$

即有

$$\boldsymbol{\Phi}^{(n)}(t) + c_{n-1}\boldsymbol{\Phi}^{(n-1)}(t) + \cdots + c_1\boldsymbol{\Phi}'(t) + c_0\boldsymbol{\Phi}(t) = \boldsymbol{O}, \quad \forall\, t \in R \tag{2}$$

将定理初始条件代入式 (1) 及其 $1, 2, \cdots, n-1$ 阶导数，又有

$$\left.\begin{aligned}
\boldsymbol{\Phi}(0) &= x_1(0)\boldsymbol{I} + x_2(0)\boldsymbol{A} + \cdots + x_n(0)\boldsymbol{A}^{n-1} = \boldsymbol{I} \\
\boldsymbol{\Phi}'(0) &= x_1'(0)\boldsymbol{I} + x_2'(0)\boldsymbol{A} + \cdots + x_n'(0)\boldsymbol{A}^{n-1} = \boldsymbol{A} \\
&\cdots \\
\boldsymbol{\Phi}^{(n-1)}(0) &= x_1^{(n-1)}(0)\boldsymbol{I} + x_2^{(n-1)}(0)\boldsymbol{A} + \cdots + x_n^{(n-1)}(0)\boldsymbol{A}^{n-1} = \boldsymbol{A}^{n-1}
\end{aligned}\right\} \tag{3}$$

因此，由式 (1) 定义的矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 是满足具有初始条件式 (3) 的矩阵微分方程式 (2) 的解。根据定理 8.3.3 知，这个解是唯一的。又因为式 (1) 的右边等于 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$，故式 (1) 即是式 (8.3.20)，定理得证。 ■

式 (8.3.20) 给出了计算矩阵指数函数 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$ 的一种有效方法。

例 8.3.4 已知矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{bmatrix}$$

利用定理 8.3.4 求 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$。

解 根据矩阵 $\boldsymbol{A}$，可以写出相对应的标量微分方程组

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} &= x + 0y + z \\
\frac{\mathrm{d}y(t)}{\mathrm{d}t} &= 0x + y + 0z \\
\frac{\mathrm{d}z(t)}{\mathrm{d}t} &= 0x + 0y + 2z
\end{aligned}$$

由特征方程 $\det(\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}) = 0$ 求得矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 2$，即特征值 1 的多重度为 2。

由定理 8.3.4 知，矩阵指数函数

$$e^{\boldsymbol{A}t} = x_1(t)\boldsymbol{I} + x_2(t)\boldsymbol{A} + x_3(t)\boldsymbol{A}^2$$

式中，$x_1(t), x_2(t), x_3(t)$ 是三阶标量微分方程

$$x'''(t) + c_2 x''(t) + c_1 x'(t) + c_0 x(t) = 0$$

满足初始条件

$$\left.\begin{array}{r} x_1(0)=1 \\ x_1'(0)=0 \\ x_1''(0)=0 \end{array}\right\}, \quad \left.\begin{array}{r} x_2(0)=0 \\ x_2'(0)=1 \\ x_2''(0)=0 \end{array}\right\}, \quad \left.\begin{array}{r} x_3(0)=0 \\ x_3'(0)=0 \\ x_3''(0)=1 \end{array}\right\}$$

的解。

由于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\lambda_1 = 1, \lambda_2 = 1, \lambda_3 = 2$ 知，标量微分方程 $x'''(t) + c_2 x''(t) + c_1 x'(t) + c_0 x(t) = 0$ 的通解由

$$x(t) = a_1 t e^t + a_2 e^t + a_3 e^{2t}$$

给出。

由上述通解公式易得以下结果：

(1) 将初始条件 $x_1(0) = 1, x_1'(0) = 0, x_1''(0) = 0$ 代入通解公式，得

$$\begin{cases} a_2 + a_3 = 1 \\ a_1 + a_2 + 2a_3 = 0 \\ 2a_1 + a_2 + 4a_3 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_1 = -2 \\ a_2 = 0 \\ a_3 = 1 \end{cases}$$

即满足初始条件 $x_1(0) = 1, x_1'(0) = 0, x_1''(0) = 0$ 的特解为

$$x_1(t) = -2te^t + e^{2t}$$

(2) 由初始条件 $x_2(0) = 0, x_2'(0) = 1, x_2''(0) = 0$ 得

$$\begin{cases} a_2 + a_3 = 0 \\ a_1 + a_2 + 2a_3 = 1 \\ 2a_1 + a_2 + 4a_3 = 0 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_1 = 1 \\ a_2 = 2 \\ a_3 = -1 \end{cases}$$

从而得满足初始条件 $x_2(0) = 0, x_2'(0) = 1, x_2''(0) = 0$ 的特解为

$$x_2(t) = te^t + 2e^t - e^{2t}$$

(3) 由初始条件 $x_3(0) = 0, x_3'(0) = 0, x_3''(0) = 1$ 得

$$\begin{cases} a_2 + a_3 = 0 \\ a_1 + a_2 + 2a_3 = 0 \\ 2a_1 + a_2 + 4a_3 = 1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} a_1 = -1 \\ a_2 = -1 \\ a_3 = 1 \end{cases}$$

换言之，满足初始条件 $x_3(0)=0, x_3'(0)=0, x_3''(0)=1$ 的特解为

$$x_3(t) = -te^t - e^t + e^{2t}$$

计算知

$$\boldsymbol{A}^2 = \begin{bmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1 & 0 & 3\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 4\end{bmatrix}$$

因此，由定理 8.3.4 可求得

$$\begin{aligned} e^{\boldsymbol{A}t} &= x_1(t)\boldsymbol{I} + x_2(t)\boldsymbol{A} + x_3(t)\boldsymbol{A}^2 \\ &= (-2tc^t + e^{2t})\begin{bmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{bmatrix} + (te^t + 2e^t - e^{2t})\begin{bmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 2\end{bmatrix} + \\ &\quad (-te^t - e^t + e^{2t})\begin{bmatrix}1 & 0 & 3\\ 0 & 1 & 0\\ 0 & 0 & 4\end{bmatrix} \end{aligned}$$

即有

$$e^{\boldsymbol{A}t} = \begin{bmatrix} -2te^t + e^t + e^{2t} & 0 & -2te^t - e^t + 2e^{2t} \\ 0 & -2te^t + e^t + e^{2t} & 0 \\ 0 & 0 & -4te^t + 3e^{2t} \end{bmatrix}$$

除了矩阵指数函数外，利用矩阵幂，还可以定义以下矩阵函数：

矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 的正弦

$$\sin(\boldsymbol{A}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k+1)!}\boldsymbol{A}^{2k+1} \tag{8.3.22}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 的余弦

$$\cos(\boldsymbol{A}) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{(2k)!}\boldsymbol{A}^{2k} \tag{8.3.23}$$

总结以上讨论，可以得出结论：Cayley-Hamliton 定理为矩阵求逆、矩阵幂的计算、线性微分方程的求解 (或等价于矩阵指数函数的计算) 提供了非常有效的工具。很难想象，如果没有 Cayley-Hamilton 定理，即便只是 3×3 矩阵的幂函数 $\boldsymbol{A}^{798}$ 的计算也将显得异常复杂和耗时，人工计算将是一件难于承受的负担！

8.4 Hermitian 矩阵的特征值分解

前面几节关于特征值和特征向量的所有讨论都是针对一般矩阵的，并没有要求矩阵一定是实对称或者复共轭对称的。然而，在统计与信息科学中，经常遇到实对称矩阵或 Hermitian(复共轭对称) 矩阵。例如，对于实观测数据向量 $\boldsymbol{x}(t)$，其自相关矩阵 $\boldsymbol{R} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(t)\}$ 是实对称矩阵，而复观测数据向量 $\boldsymbol{x}(t)$ 的自相关矩阵 $\boldsymbol{R} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\}$ 为 Hermitian 矩阵。另外一方面，由于实对称矩阵是 Hermitian 矩阵的特例，而 Hermitian

矩阵的特征值和特征向量具有一系列重要的性质，所以有必要对 Hermitian 矩阵的特征分析进行专门的讨论。

8.4.1 Hermitian 矩阵的特征值和特征向量

Hermitian 矩阵的特征值和相对应的特征向量具有以下重要性质。

定理 8.4.1 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值一定是实的。

证明 令 λ 和 $\boldsymbol{u}$ 分别是 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值和与之对应的特征向量，即 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}$。两边同时左乘特征向量的共轭转置，得二次型标量值函数 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}$。取共轭转置后，即有 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda^*\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}$，于是有 $\lambda\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}=\lambda^*\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}$。注意到内积 $\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}$ 总取实数值，故有 $\lambda=\lambda^*$，即特征值 λ 必定是实数。 ■

定理 8.4.2 令 $(\lambda,\boldsymbol{u})$ 是 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征对。若 $\boldsymbol{A}$ 可逆，则 $\left(\frac{1}{\lambda},\boldsymbol{u}\right)$ 是逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的特征对。

证明 由 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}$ 得 $\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{u}$ 即 $\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{u}=\frac{1}{\lambda}\boldsymbol{u}$。就是说，$\left(\frac{1}{\lambda},\boldsymbol{u}\right)$ 是逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 的特征对。 ■

对于 $n\times n$ 维 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$，若它所有不同的特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 都通过求解特征方程 (8.1.8) 获得，就可以利用下面的两个步骤求出与这些特征值对应的特征向量。

(1) 利用高斯消去法求解方程

$$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0} \tag{8.4.1}$$

得到与每个已知 λ 对应的非零解 $\boldsymbol{x}$。

(2) 利用 Gram-Schmidt 正交化方法将 $\boldsymbol{x}$ 正交化，得到相互正交、并且具有单位范数的特征向量。

下面的引理描述了 Hermitian 矩阵的多重特征值与秩之间的关系。

引理 8.4.1 若 λ_k 是 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}$ 的多重特征值，并且其多重度为 m_k，则

$$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}-\lambda_k\boldsymbol{I})=n-m_k \tag{8.4.2}$$

证明 见文献 [411, p.308]。

由这一引理知，任何一个 Hermitian 矩阵都满足可对角化定理的充要条件。因此，直接可得下面的推论。

推论 8.4.1 任意一个 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 都是可对角化的，即

$$\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{\Sigma},\qquad \boldsymbol{A}\ \text{是 Hermitian 矩阵} \tag{8.4.3}$$

下面推导 Hermitian 矩阵的具体相似范式。为此，需要一个重要的定理。

定理 8.4.3 Hermitian 矩阵的所有特征向量线性无关，并且相互正交。即是说，特征矩阵 $\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n]$ 是酉矩阵，满足 $\boldsymbol{U}^{-1}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$。

证明 [411, pp.290–291] 证明分为两步。

第一步证明 Hermitian 矩阵与不同特征值对应的特征向量相互正交。令 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_1 = \lambda_1\boldsymbol{u}_1$，$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_2 = \lambda_2\boldsymbol{u}_2$，其中，$\lambda_1 \neq \lambda_2$。由这两个式子分别得 $\boldsymbol{u}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_1 = \lambda_1\boldsymbol{u}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_1$，$\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_2 = \lambda_2\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_2$。对前一个式子取共轭转置，并注意到特征值为实数，立即有 $\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_2 = \lambda_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_2$，故 $\lambda_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_2 = \lambda_2\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_2$ 或者 $(\lambda_1 - \lambda_2)\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_2 = 0$，从而得 $\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_2 = 0$，即特征向量 $\boldsymbol{u}_1$ 与 $\boldsymbol{u}_2$ 正交，因为特征值 $\lambda_1 \neq \lambda_2$。

第二步证明与多重特征值对应的特征向量也相互正交。若 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}$ 的特征值 λ_k 具有多重度 m_k，则由引理 8.4.1 知 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A} - \lambda_k\boldsymbol{I}) = n - m_k$，并且矩阵 $(\boldsymbol{A} - \lambda_k\boldsymbol{I})$ 是奇异的。于是，存在与 λ_k 对应的 m_k 个特征向量，它们是方程 $(\boldsymbol{A} - \lambda_k\boldsymbol{I})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$ 的线性无关解。由命题 1.8.1 知，这些线性无关的解 $\boldsymbol{u}$ 是正交的。因此，若 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A} - \lambda_k\boldsymbol{I}) = n - m_k$，则存在与 λ_k 对应的 m_k 个特征向量线性无关，并且彼此正交。

由于特征矩阵 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n]$ 的所有特征向量既线性无关，又相互正交，故 $\boldsymbol{U}$ 为酉矩阵，满足 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}$，即 $\boldsymbol{U}^{-1} = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$。 ■

将定理 8.4.3 应用于相似范式 (8.2.46)，立即得到

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n) \tag{8.4.4}$$

或者

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{8.4.5}$$

称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 在正交相似下的范式 (canonical form under orthogonal similarity) [411, p.291]。

式 (8.4.5) 经常写成级数展开形式

$$\boldsymbol{A} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}} \tag{8.4.6}$$

这一形式称为 Hermitian 矩阵的谱分解。

式 (8.1.1)，式 (8.4.4) ~ 式 (8.4.6) 是 Hermitian 矩阵的特征值分解常见的四种形式。MATLAB 函数 [Lambda，U]= eig(A) 可用于求 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个特征值 λ_i 及其对应的特征向量 $\boldsymbol{u}_i, i = 1, 2, \cdots, n$。

在最优化理论和信号处理中，经常遇到二次型函数 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$。利用式 (8.4.6)，可以将二次型函数写作

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i |\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i|^2 \tag{8.4.7}$$

式 (8.4.6) 带来的一个方便是 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的逆矩阵的级数展开形式。由定理 8.4.3 知，逆矩阵的级数展开形式为

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{\lambda_i} \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}} \tag{8.4.8}$$

因此，若已知 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解，则可根据上式直接求出其逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$。

在许多特征值计算中，常常将原问题分解为几个更小的特征值问题。下面的结果是这种特征值简化的基础。

引理 8.4.2 若 $\boldsymbol{T} \in C^{n\times n}$ 分块为

$$\boldsymbol{T} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{T}_{11} & \boldsymbol{T}_{12} \\ 0 & \boldsymbol{T}_{22} \end{bmatrix} \begin{matrix} p \\ q \end{matrix}$$

则 $\lambda(\boldsymbol{T}) = \lambda(\boldsymbol{T}_{11}) \cup \lambda(\boldsymbol{T}_{22})$，其中，$n = p + q$。

证明 设

$$\boldsymbol{T}\boldsymbol{x} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{T}_{11} & \boldsymbol{T}_{12} \\ 0 & \boldsymbol{T}_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 \\ \boldsymbol{x}_2 \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \boldsymbol{x}_1 \\ \boldsymbol{x}_2 \end{bmatrix}$$

其中，$\boldsymbol{x}_1 \in C^p$，$\boldsymbol{x}_2 \in C^q$。若 $\boldsymbol{x}_2 \neq \boldsymbol{0}$，则 $\boldsymbol{T}_{22}\boldsymbol{x}_2 = \lambda\boldsymbol{x}_2$，从而 $\lambda \in \lambda(\boldsymbol{T}_{22})$。若 $\boldsymbol{x}_2 = \boldsymbol{0}$，则 $\boldsymbol{T}_{11}\boldsymbol{x}_1 = \lambda x_1$，从而 $\lambda \in \lambda(T_{11})$。于是，$\lambda(\boldsymbol{T}) \in \lambda(\boldsymbol{T}_{11}) \cup \lambda(\boldsymbol{T}_{22})$。但是，由于 $\lambda(\boldsymbol{T})$ 和 $\lambda(\boldsymbol{T}_{11}) \cup \lambda(\boldsymbol{T}_{22})$ 具有相同的基数，所以两个集合相等。 ■

关于两个 Hermitian 矩阵的同时对角化，有下面的两个定理。

定理 8.4.4 对于两个 $n \times n$ 维 Hermitian 矩阵，存在一个酉矩阵 $\boldsymbol{P}$ 使得 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}$ 两个都是对角矩阵，当且仅当 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{A}$。

证明 见文献 [189] 或文献 [411, pp.312~313]。

定理 8.4.5 对于两个 $n \times n$ 维非负定 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$，存在一个非奇异矩阵 $\boldsymbol{P}$，使得 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{P}$ 均为对角矩阵。

证明 见文献 [331] 或文献 [411, pp.313~314]。

8.4.2 Hermitian 矩阵的正定性

在第 1 章介绍矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的二次型函数 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 时，曾经强调，为了保证矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的唯一性，通常假定 $\boldsymbol{A}$ 为 Hermitian 矩阵，并且还给出了正定矩阵、半正定矩阵、负定矩阵、半负定矩阵和不定矩阵的定义。事实上，假定 Hermitian 矩阵的主要原因不仅是因为对于特定的二次型函数 $f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$，存在唯一的 Hermitian 矩阵满足 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = f(x_1, x_2, \cdots, x_n)$，而且还因为 Hermitian 矩阵具有一系列有用的性质。

鉴于只讨论 Hermitian 矩阵的二次型，二次型又叫 Hermitian 型，它是一实的标量

$$H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} r_{ij}\boldsymbol{x}_i^*\boldsymbol{x}_j \tag{8.4.9}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为二次型的核 (矩阵)。在核取单位矩阵 (即 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}$) 时，二次型退化为向量 $\boldsymbol{x}$ 与它自身的内积 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$。因此，二次型可以视为内积的推广。

考虑酉变换之后的二次型。令 $H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 为二次型，并定义线性变换 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{R}\boldsymbol{y}$，其中，$\boldsymbol{R}$ 为酉矩阵。此时，可以将原二次型 $H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x})$ 改写为

$$H(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x}) = \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{R}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}\boldsymbol{y} \tag{8.4.10}$$

式中

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{R} \tag{8.4.11}$$

特别地，若选择酉矩阵 $\boldsymbol{R}$ 使得 $\boldsymbol{P}$ 为对角矩阵，则称

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{R})\boldsymbol{y} = \boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)\boldsymbol{y} \tag{8.4.12}$$

为标准二次型。因为 $\boldsymbol{R}$ 是酉矩阵，有 $\boldsymbol{R}^{-1}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}$。不妨令 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma U}^{\mathrm{H}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解，并将它代入原二次型 $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})$，得

$$H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U\Sigma U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

定义酉矩阵 $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{U}$，则 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{y}$ 或 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$。于是，二次型变作

$$H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{y}=\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{x}\rangle=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|y_i|^2 \tag{8.4.13}$$

即经过酉变换 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{R}\boldsymbol{y}$ 后，二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 的值等于二次型的核矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值与 y_i 的模值平方的乘积之和。

当向量 $\boldsymbol{x}$ 为零向量时，所有的二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 都等于零。然而，对于某些特殊的 Hermitian 矩阵，其二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 或大于零或等于零。为了看清楚这一点，观察式 (8.4.13)，容易得出下列关系。

(1) 若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值全部大于零，则由于 $|y_i|$ 不全部为零，故二次型 $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})>0$。

(2) 令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的某些特征值 $\lambda_i(i=i_1,i_2,\cdots,i_K)$ 等于零，其他特征值大于零，若 $y_i=0,i\neq i_1,i_2,\cdots,i_K$，则二次型 $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=0$；若 $y_i\neq 0,\forall\, i\neq i_1,i_2,\cdots,i_K$，则 $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})>0$。因此，当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有特征值等于零，其余特征值大于零时，二次型 $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})\geqslant 0$。

(3) 若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值全部小于零，则由于 $|y_i|$ 不全部为零，故二次型 $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})<0$。

(4) 令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的某些特征值 $\lambda_i(i=i_1,i_2,\cdots,i_K)$ 等于零，其他特征值小于零，若 $y_i=0,i\neq i_1,i_2,\cdots,i_K$，则二次型 $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})=0$；若 $y_i\neq 0,\forall\, i\neq i_1,i_2,\cdots,i_K$，则 $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})<0$。因此，当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 有特征值等于零，其余特征值小于零时，二次型 $H(\boldsymbol{x},\boldsymbol{x})\leqslant 0$。

二次型和核矩阵之间的关系 (1) 可以引出 Hermitian 矩阵的正定性，其判据如下。

一个 $n\times n$ 复共轭对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是正定的，当且仅当它满足以下任何一个条件：

(1) 二次型函数 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}>0,\quad\forall\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$。

(2) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征值都大于零。

(3) 所有主子矩阵 $\boldsymbol{A}_k,1\leqslant k\leqslant n$ 都具有正的行列式，其中，$\boldsymbol{A}_k=\boldsymbol{A}(1:k,1:k)$ 由矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 $1\sim k$ 行和第 $1\sim k$ 列组成。

(4) 存在一个非奇异的 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{R}$，使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}$。

(5) 存在一个非奇异的 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{P}$，使得共轭对称矩阵 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 是正定的。

令 $\boldsymbol{z}$ 为一高斯随机向量。为方便计，假定它具有零均值向量。此时，高斯随机向量的协方差矩阵 $\boldsymbol{C}_{zz}$ 定义为随机向量 $\boldsymbol{z}$ 与它自身的外积的期望值，即 $\boldsymbol{C}_{zz}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{z}\boldsymbol{z}^{\mathrm{H}}\}$。协方差矩阵总是正定的，其证明如下：首先，以协方差矩阵为核的二次型可以写作 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_{zz}\boldsymbol{x}=\mathrm{E}\{|\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{z}|^2\}$。由于向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{z}$ 分别为常数向量和随机向量，它们不可能正交，即内积 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{z}\neq 0$。于是，二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_{zz}\boldsymbol{x}>0$，即协方差矩阵 $\boldsymbol{C}_{zz}$ 是正定矩阵。

正定矩阵具有以下性质：

(1) 正定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有对角线元素都是正的。

(2) 正定矩阵的行列式大于零，即 $\det(\boldsymbol{A}) > 0$，因而 $\boldsymbol{A}$ 是非奇异的。

(3) 逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 是正定的。

(4) 正定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的对角线元素满足不等式 $a_{ii}a_{jj} > |a_{ij}|^2$，$i \neq j$。

(5) 正定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有最大绝对值的元素一定在对角线上。

(6) 正定矩阵删去第 k 行和第 k 列 $(1 \leqslant k \leqslant n)$ 之后，仍然是正定的。

令矩阵 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n]$，其中，$\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量。若 $\boldsymbol{A}$ 为 Hermitian 矩阵，且具有不同的特征值，则它的特征向量互相正交。这意味着 $\boldsymbol{U}$ 必然满足 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}$，即 $\boldsymbol{U}$ 是酉矩阵。将 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i$，$i = 1, 2, \cdots, n$ 合写，即有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{U} \begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_n \end{bmatrix} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}$$

式中，$\boldsymbol{\Sigma} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$ 为对角矩阵。由于 $\boldsymbol{U}$ 为酉矩阵，上式可改写作 Hermitian 矩阵的特征值分解的另一种常见表达形式：

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{8.4.14}$$

由行列式和迹的性质，从上式易得

$$\det(\boldsymbol{A}) = \det(\boldsymbol{U})\det(\boldsymbol{\Sigma})\det(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}) = \prod_{i=1}^{n} \lambda_i \tag{8.4.15}$$

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Sigma}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i \tag{8.4.16}$$

式中，利用了酉矩阵的行列式等于 1 这一事实。

对于正定 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$，其逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}$ 存在。由式 (8.4.14) 知

$$\boldsymbol{A}^{-1} = \boldsymbol{U}\mathrm{diag}(\lambda_1^{-1}, \lambda_2^{-1}, \cdots, \lambda_n^{-1})\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{8.4.17}$$

正定矩阵和半正定矩阵服从下面一些重要的不等式 [224, Sec.8.7]。

(1) Hadamard 不等式：若 $m \times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A} = [a_{ij}]$ 正定，则

$$\det(\boldsymbol{A}) \leqslant \prod_{i=1}^{m} a_{ii}$$

当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 是对角矩阵，等式成立。

(2) Fischer 不等式：令分块矩阵 $\boldsymbol{P}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{A} & \boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{C}\end{bmatrix}$ 为正定矩阵，其中，分块矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 是正方的非零矩阵，则

$$\det(\boldsymbol{P})\leqslant\det(\boldsymbol{A})\det(\boldsymbol{C})$$

(3) Oppenheim 不等式：如果 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是半正定矩阵，则

$$\det(\boldsymbol{A})\prod_{i=1}^{m}b_{ii}\leqslant\det(\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B})$$

式中，$\boldsymbol{A}\odot\boldsymbol{B}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的 Hadamard 积。

(4) Ostrowski-Taussky 定理：若 $H(\boldsymbol{A}_{m\times m})=\frac{1}{2}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 为正定矩阵，则

$$\det H(\boldsymbol{A})\leqslant|\det(\boldsymbol{A})|$$

等号成立，当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 为自伴随矩阵，即 $\boldsymbol{A}^{\#}=\boldsymbol{A}$。

(5) Minkowski 不等式：若 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 是正定矩阵，则

$$\sqrt[n]{\det(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})}\geqslant\sqrt[n]{\det(\boldsymbol{A})}+\sqrt[n]{\det(\boldsymbol{B})}$$

令 z_A 是 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 的零特征值的个数，则 $n-z_A$ 是 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的非零特征值的个数。由于 $\boldsymbol{U}$ 为非奇异矩阵，所以由 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma U}^{\mathrm{H}}$ 知 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=\mathrm{rank}(\boldsymbol{\Sigma})$。注意到，对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的非零元素就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的非零特征值。因此，对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的秩等于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非零特征值的个数，即 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{\Sigma})=n-z_A$。于是，有

$$\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=n-z_A \tag{8.4.18}$$

即 Hermitian 矩阵的秩等于其非零特征值的个数。

定理 8.4.6 一个 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值都是非负的，当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 是非负定 (或半正定) 的。

证明 $n\times n$ 维 Hermitian 矩阵的特征值分解 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma U}^{\mathrm{H}}$，其中，$\boldsymbol{U}$ 为酉矩阵，对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$，且 $\lambda_i(i=1,2,\cdots,n)$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值。于是，二次型 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U\Sigma U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Sigma y}$，其中，$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$。因此，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非负定，当且仅当 $\boldsymbol{\Sigma}$ 非负定。但是，由于 $\boldsymbol{\Sigma}$ 是对角矩阵，所以 $\boldsymbol{\Sigma}$ 非负定，当且仅当 $\lambda_i\geqslant 0, i=1,2,\cdots,n$。本定理得证。 ■

推论 8.4.2 一个 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值都是正的，当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 是正定的。

证明 在定理 8.4.6 的证明中，只要将“非负定”替换为“正定”，以及将 $\lambda_i\geqslant 0$ 替换为 $\lambda_i>0$，即可得到本推论。 ■

类似地，还可证明以下结论：

(1) Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值都是非正的，当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 是非正定 (或半负定) 的。

(2) Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值都是负的，当且仅当 $\boldsymbol{A}$ 是负定的。

Hermitian 矩阵可以分成三类：

有定矩阵　正定矩阵和负定矩阵的统称；

半定矩阵　半正定矩阵和半负定矩阵的合称；

不定矩阵　既非有定，又非半定的矩阵。

结合上述讨论和行列式的有关知识，表 8.4.1 给出了实对称矩阵的分类及各类矩阵的充分必要条件。

表 8.4.1　实对称矩阵的分类及各类矩阵的充分必要条件

名　称	定　义	充分必要条件
正定矩阵	特征值都大于零的实对称矩阵	所有主子式都大于零，即 $\det(\boldsymbol{A}_i) > 0\,(i = 1, 2, \cdots, n)$
半正定矩阵	特征值都不小于零的实对称矩阵	$\det(\boldsymbol{A}) = 0$ $\det(\boldsymbol{A}_i) \geqslant 0\,(i = 1, 2, \cdots, n-1)$
负定矩阵	特征值都小于零的实对称矩阵	$\det(\boldsymbol{A}_i)\begin{cases} < 0 & (i\text{为奇数}) \\ > 0 & (i\text{为偶数}) \end{cases}$ $(i = 1, 2, \cdots, n)$
半负定矩阵	特征值都不大于零的实对称矩阵	$\det(\boldsymbol{A}) = 0$ $\det(\boldsymbol{A}_i)\begin{cases} \leqslant 0 & (i\text{为奇数}) \\ \geqslant 0 & (i\text{为偶数}) \end{cases}$ $(i = 1, 2, \cdots, n-1)$
不定矩阵	特征值既有大于零，也有小于零的实对称矩阵	或有主子式 $\det(\boldsymbol{A}_{2k}) = 0$ 或有 $\det(\boldsymbol{A}_{2i+1}) > 0$, $\det(\boldsymbol{A}_{2j+1}) < 0$, $i \neq j$

下面是 Hermitian 矩阵、斜 Hermitian 矩阵和酉矩阵等几种特殊的正规矩阵和一般的正规矩阵的特征值情况 [516, p.183]

$$
\text{正规矩阵}\begin{cases}
\text{Hermitian 矩阵} \Longleftrightarrow \text{特征值均为实值} \\
\text{斜 Hermitian 矩阵} \Longleftrightarrow \text{特征值均在虚轴上} \\
\text{酉矩阵} \Longleftrightarrow \text{特征值的复数模均等于 1} \\
\text{其他正规矩阵} \Longleftrightarrow \text{特征值无上述要求}
\end{cases}
$$

在信号处理中，常常需要计算一个 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最大或最小特征值。乘幂法 (power method) 是求这些特征值的一种方法。例如，若选择某初始向量 $\boldsymbol{x}(0)$，就可迭代地使用线性方程

$$\boldsymbol{y}(k+1) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}(k) \tag{8.4.19}$$

求出 $\boldsymbol{y}(k+1)$，再将其归一化得到

$$\boldsymbol{x}(k+1) = \frac{\boldsymbol{y}(k+1)}{\sigma_{k+1}} \tag{8.4.20}$$

$$\sigma_{k+1} = \boldsymbol{y}^{H}(k+1)\boldsymbol{y}(k+1) \tag{8.4.21}$$

迭代过程持续，直到 $\boldsymbol{x}_k$ 收敛。在最后一步得到的 σ_k 将是最大特征值，$\boldsymbol{x}(k)$ 是对应的特征向量。即便初始向量 $\boldsymbol{x}(0)$ 不与最大特征值对应的特征向量正交，收敛也是有保证的。

为了得到最小特征值以及与之对应的特征向量，仿照式 (8.4.19) 得 $\boldsymbol{y}(k+1)=\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x}(k)$，即迭代的线性方程为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}(k+1)=\boldsymbol{x}(k)$。

乘幂法和压缩映射过程相结合，可以求出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征值及对应的特征向量。其方法如下：假定用乘幂法求出了 $\boldsymbol{A}$ 的某个特征值 σ (第一步对应为 $\boldsymbol{A}$ 的第一个最大特征值)，我们就用一压缩映射过程除去此特征值，即将一个秩 k 矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 变换成秩 $k-1$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}_{k-1}$。$\boldsymbol{A}_{k-1}$ 的最大特征值就是矩阵 $\boldsymbol{A}_k$ 的小于 σ 值的最大剩余特征值 (第 k 步对应为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 个最大特征值)。应用这一思想和谱分解公式 (8.4.6)，便得到新的矩阵

$$(\boldsymbol{A}_k-\sigma\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}})\rightarrow\boldsymbol{A}_{k-1} \tag{8.4.22}$$

重复以上方法，即可依次求出矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征值。

8.4.3 对称正定特征值问题的 Jacobi 算法

前面已强调过在特征值问题 $\boldsymbol{H}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}$ 中假设 $\boldsymbol{H}$ 为对称矩阵的必要性。在很多应用中，矩阵 $\boldsymbol{H}$ 还往往是正定的。此时，称特征值问题 $\boldsymbol{H}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}$ 为对称正定特征值问题。现在考虑这一问题的精确数值计算。

对称正定矩阵 $\boldsymbol{H}_{n\times n}$ 称为依比例对角占优 (scaled diagonally dominant，s.d.d.) 矩阵，若 $\boldsymbol{H}=\boldsymbol{DAD}$ ($\boldsymbol{D}$ 为对角矩阵)，并且 $\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}}<1$。针对依比例对角占优的对称正定矩阵，文献 [27] 提出了精确计算对称正定特征值问题的数值算法。然而，依比例对角占优是一个有点苛刻的限制。例如，对称正定矩阵

$$\boldsymbol{H}=\begin{bmatrix}10^{40} & 10^{29} & 10^{19}\\ 10^{29} & 10^{20} & 10^{9}\\ 10^{19} & 10^{9} & 2\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}10^{20} & & \\ & 10^{10} & \\ & & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}1 & 0.1 & 0.1\\ 0.1 & 1 & 0.1\\ 0.1 & 0.1 & 2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}10^{20} & & \\ & 10^{10} & \\ & & 1\end{bmatrix}$$

就不是依比例对角占优矩阵，因为 $\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}}>1$。

1992 年，Demmel 与 Veselic [123] 将文献 [27] 的算法推广到适合于所有对称正定矩阵，提出了下面的算法。

算法 8.4.1 (对称正定特征值问题的双边 Jacobi 算法)

for all pairs $i<j$

计算 Jacobi 旋转，使下列 2×2 子矩阵对角化：

$$\begin{bmatrix}H_{ii} & H_{ij}\\ H_{ji} & H_{jj}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}a & c\\ c & b\end{bmatrix}$$

$\xi=(b-a)/(2c),\ t=\mathrm{sgn}(\xi)/(|\xi|+\sqrt{1+\xi^2})$

$cs=1/\sqrt{1+t^2},\ sn=cs*t$

更新 2×2 子矩阵

$H_{ii}=a-c*t$

$H_{jj}=b+c*t$

$H_{ij} = H_{ji} = 0$

更新第 i 行，第 j 列的其他元素

for $k = 1 : n$ 但 $i \neq j$

$tmp = H_{ik}$

$H_{ik} = cs * tmp - sn * H_{jk}$

$H_{jk} = sn * tmp + cs * H_{jk}$

$H_{ki} = H_{ik}$, $H_{kj} = H_{jk}$

endfor

更新特征向量矩阵 $\boldsymbol{V}$

for $k = 1 : n$

$tmp = V_{ki}$

$V_{ki} = cs * tmp - sn * V_{kj}$

$V_{kj} = sn * tmp + cs * V_{kj}$

endfor

endfor

若收敛条件 $|H_{ij}|/(H_{ii}H_{jj}|sj)^{1/2} \leqslant \text{tol}$, $\forall\, i,j$ 满足，则停止；否则重复以上运算。

算法中，tol 是用户自己定义的停止准则，一般选 tol 为计算机精度。特征向量矩阵 $\boldsymbol{V}$ 的初始值可选择单位矩阵。

文献 [123] 通过扰动分析证明，由上述 Jacobi 算法计算出来的特征值具有几乎与原矩阵自身的固有不确定度一样小的误差界。换言之，只要原始数据的不确定度比较小，即使使用无限精度计算特征值，也不会比 Jacobi 算法好。在这个意义上讲，对称正定特征值问题的双边 Jacobi 旋转算法是一种精确的数值算法。

8.5 Fourier 矩阵与 Toeplitz 矩阵的特征值分解

在第 2 章和第 3 章，我们分别讨论了 Fourier 矩阵与 Toeplitz 矩阵这两种特殊矩阵，它们在信息科学与技术问题中经常遇到。特别地，我们会对这两种特殊矩阵的特征值与 (或) 特征向量感兴趣。

8.5.1 Fourier 矩阵的特征值

首先讨论 Fourier 矩阵的特征值问题。令 $\boldsymbol{F}_n$ 是一个 $n \times n$ Fourier 矩阵，其第 i 行，第 k 列的元素 $F_n(i,k) = w^{(i-1)(k-1)}/\sqrt{n}$，即 Fourier 矩阵为

$$\boldsymbol{F}_n = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & \cdots & 1 \\ 1 & w & w^2 & \cdots & w^{n-1} \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & w^{n-1} & w^{2(n-1)} & \cdots & w^{(n-1)(n-1)} \end{bmatrix} \tag{8.5.1}$$

式中，$w = e^{j2\pi/n}$。

令 $c_1, c_2, \cdots, c_n$ 是 Fourier 矩阵 $\boldsymbol{F}_n$ 的特征值，则 $c_1^2, c_2^2, \cdots, c_n^2$ 是矩阵 $\boldsymbol{F}_n^2$ 的特征值。直接计算知 $\boldsymbol{F}_n^2$ 的元素为

$$a_{ik} = \begin{cases} 1, & i+k=2 \text{ 或 } i+k=n+2 \\ 0, & \text{其他} \end{cases}$$

于是，矩阵 $\boldsymbol{F}_n^2$ 的特征值为 $+1$ 和 -1，它们的多重度分别为 $[(n+2)/2]$ 和 $[(n-1)/2]$，其中，$[\cdot]$ 表示取其整数部分。就是说，Fourier 矩阵 $\boldsymbol{F}_n$ 的特征值取 $1, -1, j, -j$。令特征值 c 的多重度为 $L_n(c)$，则

$$L_n(1) + L_n(-1) = [(n+2)/2]$$

和

$$L_n(j) + L_n(-j) = [(n-1)/2]$$

利用矩阵的迹与特征值之间的关系知，Fourier 矩阵的迹为

$$\text{tr}(\boldsymbol{F}_n) = L_n(1) - L_n(-1) + [L_n(j) - L_c(-j)]j \tag{8.5.2}$$

而直接计算 Fourier 矩阵所有对角元素之和，又知 $\boldsymbol{F}_n$ 的迹为

$$\sqrt{n}\,\text{tr}(\boldsymbol{F}_n) = \sum_{k=1}^{n} w^{(k-1)^2}$$

这是所谓的高斯求和，即有

$$\text{tr}(\boldsymbol{F}_n) = (1+j)(1+j^{-n})/2 = \begin{cases} 1+j, & n=0 \\ 1, & n=1 \\ 0, & n=2 \\ j, & n=3 \end{cases} \pmod 4 \tag{8.5.3}$$

由式 (8.5.2) 和式 (8.5.3)，可以得到四个特征值 $1, -1, j, -j$ 各自的多重度 $L_n(c)$ 如表 8.5.1 所示。

表 8.5.1 Fourier 矩阵的特征值

n	$4k+1$	$4k+2$	$4k+3$	$4k+4$
$L_n(1)$	$k+1$	$k+1$	$k+1$	$k+2$
$L_n(-1)$	k	$k+1$	$k+1$	$k+1$
$L_n(j)$	k	k	$k+1$	$k+1$
$L_n(-j)$	k	k	k	k

关于 Fourier 矩阵的上述特征值问题是由 Efroymson 等人提出，并由 Sekiguchi 与 Kimura 等人解答的 [143]。

8.5.2 Toeplitz 矩阵的特征值分解

由于在信号处理等工程中遇到的 Toeplitz 矩阵大多数是对称的，而且许多问题的分析与解决都离不开对称 Toeplitz 矩阵的特征值与特征向量，所以有必要就对称 Toeplitz 矩阵的特征值问题进行专门讨论。为了方便讨论，这里假定 $\boldsymbol{B} \in R^{N\times N}$ 为对称 Toeplitz 矩阵，$\boldsymbol{C} \in R^{N\times N}$ 为非对称 Toeplitz 矩阵，并令 $\boldsymbol{J} \in R^{N\times N}$ 为交换矩阵 (也称后向单位矩阵)。根据交换矩阵之定义易知，对于对称矩阵 $\boldsymbol{B}$ 有

$$\boldsymbol{JBJ} = \boldsymbol{BJ} = \boldsymbol{JB} = \boldsymbol{B} \tag{8.5.4}$$

而对于非对称矩阵 $\boldsymbol{C}$，则有

$$\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{JCJ}, \qquad \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J} = \boldsymbol{JC} \tag{8.5.5}$$

注意，$\boldsymbol{JC}$ 使 $\boldsymbol{C}$ 的行序互相交换，而 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}$ 则使 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}$ 的列序互相交换，而 $\boldsymbol{C}$ 的行就是 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}$ 的列，故有 $\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J} = \boldsymbol{JC}$。

下面分两种情况讨论实对称 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的特征值和特征向量。

1. 偶数维情况

根据结构，任何一个 $2N \times 2N$ 的实对称 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{R}_{2N}$ 都可以矩阵分块成

$$\boldsymbol{R}_{2N} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{B} & \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{B} \end{bmatrix} \tag{8.5.6}$$

于是，Fourier 矩阵的特征值分解与两个分块矩阵 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{C}$ 的特征值分解有关。

定理 8.5.1 考虑式 (8.5.6) 的对称 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{R}_{2N}$ 的特征值分解。

(1) 若 $(\lambda_i, \boldsymbol{u}_i)$ 是 $N \times N$ 维矩阵 $\boldsymbol{B} + \boldsymbol{JC}$ 的特征对，则 $\left(\lambda_i, \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}, \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i)^{\mathrm{T}}\right]^{\mathrm{T}}\right)$ 是 $\boldsymbol{R}_{2N}$ 的特征对。

(2) 若 $(\mu_i, \boldsymbol{v}_i)$ 是 $N \times N$ 矩阵 $\boldsymbol{B} - \boldsymbol{JC}$ 的特征对，则 $\left(\lambda_i, \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i)^{\mathrm{T}}\right]^{\mathrm{T}}\right)$ 是 $\boldsymbol{R}_{2N}$ 的特征对。

证明 两部分的证明完全类似，因此下面只证明前一部分的结果。由假设条件及特征值 - 特征向量之定义，有

$$(\boldsymbol{B} + \boldsymbol{JC})\boldsymbol{u}_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i \tag{8.5.7}$$

利用式 (8.5.4) 和式 (8.5.5)，并注意到 $\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{I}$ (交换矩阵的对合性)，容易得到

$$\left[\boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\right] \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i \end{bmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{B} + \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J})\boldsymbol{u}_i = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{B} + \boldsymbol{JC})\boldsymbol{u}_i = \frac{1}{\sqrt{2}}\lambda_i \boldsymbol{u}_i \tag{8.5.8}$$

和

$$[C,\ B]\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}u_i\\ \frac{1}{\sqrt{2}}Ju_i\end{bmatrix}=\frac{1}{\sqrt{2}}(BJ+C)u_i=\frac{1}{\sqrt{2}}(J^2BJ+J^2C)u_i$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}J(JBJ+JC)u_i=\frac{1}{\sqrt{2}}J(B+JC)u_i$$
$$=\frac{1}{\sqrt{2}}\lambda_i Ju_i \tag{8.5.9}$$

综合式 (8.5.8) 和式 (8.5.9)，立即有

$$\begin{bmatrix}B & C^{\mathrm{T}}\\ C & B\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}u_i\\ \frac{1}{\sqrt{2}}Ju_i\end{bmatrix}=\lambda_i\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}u_i\\ \frac{1}{\sqrt{2}}Ju_i\end{bmatrix} \tag{8.5.10}$$

由于 u_i 是特征向量，故 $u_i^{\mathrm{T}}u_i=1$，$u_i^{\mathrm{T}}u_j=0\,(i\neq j)$，从而有

$$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}u_i^{\mathrm{T}},\ \frac{1}{\sqrt{2}}(Ju_i)^{\mathrm{T}}\right]\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}u_i\\ \frac{1}{\sqrt{2}}Ju_i\end{bmatrix}=\frac{1}{2}u_i^{\mathrm{T}}u_i+\frac{1}{2}u_i^{\mathrm{T}}J^{\mathrm{T}}Ju_i=1 \tag{8.5.11}$$

$$\left[\frac{1}{\sqrt{2}}u_i^{\mathrm{T}},\ \frac{1}{\sqrt{2}}(Ju_i)^{\mathrm{T}}\right]\begin{bmatrix}\frac{1}{\sqrt{2}}u_j\\ \frac{1}{\sqrt{2}}Ju_j\end{bmatrix}=\frac{1}{2}u_i^{\mathrm{T}}u_j+\frac{1}{2}u_i^{\mathrm{T}}J^{\mathrm{T}}Ju_j=0 \tag{8.5.12}$$

式 (8.5.10) ~ 式 (8.5.12) 表明，$\left(\lambda_i,\left[\frac{1}{\sqrt{2}}u_i^{\mathrm{T}},\frac{1}{\sqrt{2}}(Ju_i)^{\mathrm{T}}\right]^{\mathrm{T}}\right)$ 确实是 R_{2N} 的特征对。 ■

定理 8.5.1 的意义是：任何一个 $2N\times 2N$ 维对称 Toeplitz 矩阵 R_{2N} 的特征值分解都可以通过两个 $N\times N$ 维 Toeplitz 矩阵的特征值分解得到。

2. 奇数维情况

根据 Toeplitz 结构，任何一个 $(2N+1)\times(2N+1)$ 维对称 Toeplitz 矩阵 R_{2N+1} 都可以分块为

$$R_{2N+1}=\begin{bmatrix}B & x & C^{\mathrm{T}}\\ x^{\mathrm{T}} & r_0 & x^{\mathrm{T}}J\\ C & Jx & B\end{bmatrix} \tag{8.5.13}$$

其中，$x\in R^{N\times 1}$。在这一分块形式下，有下面的特征值分解结果。

定理 8.5.2 令对称 Toeplitz 矩阵 R_{2N+1} 按照式 (8.5.13) 分块。

(1) 若 $(\lambda_i,[u_i^{\mathrm{T}},\ \alpha_i]^{\mathrm{T}})$ 是 $(N+1)\times(N+1)$ 矩阵

$$A_1=\begin{bmatrix}B+JC & \sqrt{2}x\\ \sqrt{2}x^{\mathrm{T}} & r_0\end{bmatrix}$$

的特征对，则 $\left(\lambda_i,\left[\frac{1}{\sqrt{2}}u_i^{\mathrm{T}},\alpha_i,\frac{1}{\sqrt{2}}(Ju_i)^{\mathrm{T}}\right]^{\mathrm{T}}\right)$ 是 R_{2N+1} 的特征对。

(2) 若 $(\mu_i, \boldsymbol{v}_i)$ 是 $\boldsymbol{A}_2 = \boldsymbol{B} - \boldsymbol{J}\boldsymbol{C}$ 的特征对，则 $\left(\mu_i, \left[\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{v}_i)^{\mathrm{T}}, 0, -\frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{J}\boldsymbol{v}_i)^{\mathrm{T}}\right]^{\mathrm{T}}\right)$ 是 $\boldsymbol{R}_{2N+1}$ 的特征对。

证明 只证明前一部分，因为后一部分的证明完全类似。由假设条件有

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{B}+\boldsymbol{J}\boldsymbol{C} & \sqrt{2}\boldsymbol{x} \\ \sqrt{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} & r_0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_i \\ \alpha_i \end{bmatrix} = \lambda_i \begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_i \\ \alpha_i \end{bmatrix}$$

由此得

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_i + \boldsymbol{J}\boldsymbol{C}\boldsymbol{u}_i + \sqrt{2}\boldsymbol{x}\alpha_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i \tag{1}$$

和

$$\sqrt{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i + r_0\alpha_i = \lambda_i\alpha_i \tag{2}$$

利用式 (8.5.5) 的结果 $\boldsymbol{J}\boldsymbol{C} = \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}$ 及式 (1)，有

$$\begin{aligned}\left[\boldsymbol{B}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\right] \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i \\ \alpha_i \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i \end{bmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_i + \sqrt{2}\boldsymbol{x}\alpha_i + \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_i + \sqrt{2}\boldsymbol{x}\alpha_i + \boldsymbol{J}\boldsymbol{C}\boldsymbol{u}_i) = \frac{1}{\sqrt{2}}\lambda_i\boldsymbol{u}_i \end{aligned} \tag{3}$$

和

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{C}, \boldsymbol{J}\boldsymbol{x}, \boldsymbol{B}] \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i \\ \alpha_i \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i \end{bmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{u}_i + \sqrt{2}\boldsymbol{J}\boldsymbol{x}\alpha_i + \boldsymbol{B}\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{J}(\boldsymbol{J}\boldsymbol{B}\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i + \sqrt{2}\boldsymbol{x}\alpha_i + \boldsymbol{J}\boldsymbol{C}\boldsymbol{u}_i) \quad (\text{利用 } \boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{I}) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\lambda_i\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i \quad [\text{利用 } \boldsymbol{J}\boldsymbol{B}\boldsymbol{J} = \boldsymbol{B} \text{ 和式 (3)}] \end{aligned} \tag{4}$$

又由式 (2) 得到

$$[\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}, r_0, \ \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}] \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i \\ \alpha_i \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i \end{bmatrix} = \frac{1}{2}(\sqrt{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{u}_i + 2r_0\alpha_i + \sqrt{2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J}^2\boldsymbol{u}_i) = \lambda_i\alpha_i \tag{5}$$

式中，使用了结果 $\boldsymbol{J}^2 = \boldsymbol{I}$。综合式 (3) ~ 式 (5)，立即得到

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{B} & \boldsymbol{x} & \boldsymbol{C}^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} & r_0 & \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{J} \\ \boldsymbol{C} & \boldsymbol{J}\boldsymbol{x} & \boldsymbol{B} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i \\ \alpha_i \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i \end{bmatrix} = \lambda_i \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i \\ \alpha_i \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i \end{bmatrix}$$

这就证明了，$\left(\lambda_i, \left[\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}, \alpha_i, \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i)^{\mathrm{T}}\right]^{\mathrm{T}}\right)$ 是 $\boldsymbol{R}_{2N+1}$ 的特征对。利用 $[\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}, \alpha_i]^{\mathrm{T}}$ 是正交向量这一假设还很容易验证：向量 $\left[\frac{1}{\sqrt{2}}\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}, \alpha_i, \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{J}\boldsymbol{u}_i)^{\mathrm{T}}\right]^{\mathrm{T}}$ 是正交向量。 ■

定理 8.5.2 表明，任何一个 $(2N+1)\times(2N+1)$ 对称 Toeplitz 矩阵 $\boldsymbol{R}_{2N+1}$ 的特征值分解都可以通过 $(N+1)\times(N+1)$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_1$ 和 $N\times N$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_2=\boldsymbol{B}-\boldsymbol{J}\boldsymbol{C}$ 两个较小的特征值分解求出。

8.6 特征问题与奇异值问题的扰动分析

在计算或者使用矩阵的奇异值分解 (或特征值分解) 的时候，我们常常对矩阵本身的扰动引起的奇异值及奇异向量 (或特征值及特征向量) 的变化感兴趣。有关这一问题的讨论称为奇异值问题 (或特征问题) 的扰动分析。为了叙述的方便，下面先讨论特征问题的扰动分析。

8.6.1 特征问题的扰动分析

特征问题的扰动分析分为绝对扰动分析与相对扰动分析两类。令 $n\times n$ 实矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为对称矩阵，其扰动用 $\delta\boldsymbol{A}$ 表示。

标准的绝对扰动分析包括特征值的绝对扰动分析与特征向量的绝对扰动分析。特征值的标准绝对扰动结果系指实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}$ 的特征值满足

$$|\lambda_i[\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}]-\lambda_i[\boldsymbol{A}]|\leqslant\|\delta\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}} \tag{8.6.1}$$

式中，$\lambda_i[\boldsymbol{A}]$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 个最大特征值。

令 $\boldsymbol{u}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 $\lambda_i[\boldsymbol{A}]$ 对应的特征向量，并且 $\boldsymbol{u}'$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ' 对应的特征向量，即

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda_i[\boldsymbol{A}]\boldsymbol{u},\qquad(\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A})\boldsymbol{u}'=\lambda'\boldsymbol{u}'$$

运用正弦定理 [106]，知

$$|\sin\theta|\leqslant\frac{\|\delta\boldsymbol{A}\|_{\mathrm{F}}}{\mathrm{gap}_i} \tag{8.6.2}$$

式中，$0\leqslant\theta\leqslant\pi/2$ 是由 $\boldsymbol{u}$ 张成的子空间与由 $\boldsymbol{u}'$ 张成的子空间之间的夹角，且

$$\mathrm{gap}_i\overset{\mathrm{def}}{=}\min_{j\neq i}|\lambda_j[\boldsymbol{A}]-\lambda'| \tag{8.6.3}$$

是对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}$ 的特征值之间的绝对间隙 (absolute gap) [356]。

与式 (8.6.1) 称为特征值的标准绝对扰动结果相类似，式 (8.6.2) 称为特征向量的标准绝对扰动结果。

顾名思义，特征值和特征向量的相对扰动分析关心的是对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}$ 的特征值和特征向量之间的相对变化。

在特征值分解的范畴内，通常将扰动后的矩阵限定为

$$\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}=\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D},\quad \boldsymbol{D}\text{ 非奇异} \tag{8.6.4}$$

换言之，所有扰动矩阵限定为不得改变原对称矩阵的秩。

为了方便叙述相对扰动分析的结果，下面用 λ_i 和 λ_i' 分别表示 $n\times n$ 对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}$ 的第 i 个特征值，$\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{u}_i'$ 分别是与特征值 λ_i 和 λ_i' 对应的特征向量，θ_i 表示由 $\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{u}_i'$ 分别张成的两个子空间之间的夹角，$0\leqslant\theta_i\leqslant\pi/2$。定义

$$\rho_i\stackrel{\text{def}}{=}\min_{j\neq i}\frac{|\lambda_j-\lambda_i|}{|\lambda_i|} \tag{8.6.5}$$

为 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 个特征值的相对间隙 (relative gap)。

Eisenstat 与 Ipsen [144] 证明了下面两个定理。

定理 8.6.1 [144] 令 $\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}=\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}$，其中，$\boldsymbol{D}$ 为非奇异矩阵，则

$$\frac{|\lambda_i|}{\|(\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D})^{-1}\|_{\mathrm{F}}}\leqslant|\lambda_i|\,\|\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\|_{\mathrm{F}} \tag{8.6.6}$$

和

$$|\lambda_i'-\lambda_i|\leqslant|\lambda_i|\,\|\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}} \tag{8.6.7}$$

这一定理描述了扰动矩阵引起的特征值的相对变化，因为式 (8.6.7) 可以等价写作

$$\frac{|\lambda_i'-\lambda_i|}{|\lambda_i|}\leqslant\|\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}} \tag{8.6.8}$$

换言之，特征值的相对变化由非奇异矩阵 $\boldsymbol{D}$ 偏离正交矩阵的离差决定。相对扰动结果表达式 (8.6.7) 表明，第 i 个特征值的绝对扰动 $|\lambda_i'-\lambda_i|$ 以 $|\lambda_i|\,\|\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}}$ 为上界。

定理 8.6.2 [144] 令 $\boldsymbol{A}+\delta\boldsymbol{A}=\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}$，其中，$\boldsymbol{D}$ 为非奇异矩阵。若定义

$$\beta\stackrel{\text{def}}{=}\|\boldsymbol{D}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}},\ \gamma\stackrel{\text{def}}{=}\|\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}},\ \delta\stackrel{\text{def}}{=}\|\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}\|_{\mathrm{F}}\,\|\boldsymbol{D}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{D}^{-1}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}} \tag{8.6.9}$$

则

$$\sin\theta_i\leqslant\frac{\delta}{\rho_i-\gamma}+\beta \tag{8.6.10}$$

假定 $\rho_i>\gamma$。

定理 8.6.2 表明，由真实特征向量 $\boldsymbol{u}_i$ 和相应的被扰动特征向量 $\boldsymbol{u}_i'$ 分别张成的子空间之间的夹角的正弦的上界，由矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 个特征值 λ_i 的相对间隙 ρ_i 决定。定理中的参数 β 和 γ 分别代表矩阵 $\boldsymbol{D}$ 偏离单位矩阵和偏离正交矩阵的离差。

8.6.2 奇异值问题的扰动分析

考虑奇异值问题的扰动分析。令 $\boldsymbol{B}$ 和 $\delta\boldsymbol{B}$ 为 $m\times n$ 矩阵，它们的奇异值分别为 σ_i 和 σ_i'，与之对应的左奇异向量分别为 $\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{u}_i'$，右奇异向量分别为 $\boldsymbol{v}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_i'$。将 $\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{u}_i'$ 分别张成的两个子空间的夹角记为 θ_i^u $(0\leqslant\theta_i^u\leqslant\pi/2)$，由 $\boldsymbol{v}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_i'$ 分别张成的子空间之间的夹角记为 θ_i^v $(0\leqslant\theta_i^v\leqslant\pi/2)$。

定义

$$\bar{\rho}_i \stackrel{\text{def}}{=} \min\left\{2, \min_{j\neq i}\frac{|\sigma_j-\sigma_i|}{|\sigma_i|}\right\} \tag{8.6.11}$$

它表示由于扰动的作用，所引起的 $m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的第 i 个奇异值变化的相对间隙。

在奇异值问题的扰动分析中，通常以满足 $\boldsymbol{B}+\delta\boldsymbol{B}=\boldsymbol{D}_L\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}_R$ ($\boldsymbol{D}_L$ 和 $\boldsymbol{D}_R$ 非奇异) 的一类扰动矩阵 $\delta\boldsymbol{B}$ 为讨论对象 [27],[144]。

有两种方法可以将奇异值问题的扰动分析转换为特征问题的扰动分析。第一种方法是使用 $\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}$ 或者 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}$ 的特征值的正平方根作为矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的奇异值，即

$$\sigma_i=\sqrt{\lambda_i[\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}]}=\sqrt{\lambda_i[\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}]},\quad i=1,2,\cdots,\min\{m,n\}$$

第二种方法利用 Jordan-Wielandt 矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{B} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}\text{ 为正方矩阵}$$

其特征值为 $\pm\sigma_i$，并且

$$\boldsymbol{w}_i=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_i\\ \boldsymbol{v}_i\end{bmatrix}$$

是与特征值 $\lambda_i=\sigma_i$ 对应的特征向量。

利用以上两种方法，Eisenstat 与 Ipsen [144] 分别证明了下面两个定理。

定理 8.6.3 [144] 令 $\boldsymbol{B}+\delta\boldsymbol{B}=\boldsymbol{D}_L\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}_R$，其中，$\boldsymbol{D}_L$ 和 $\boldsymbol{D}_R$ 为非奇异矩阵，则

$$\frac{\sigma_i}{\|\boldsymbol{D}_L^{-1}\|_{\mathrm{F}}\|\boldsymbol{D}_R^{-1}\|_{\mathrm{F}}}\leqslant\sigma_i'\leqslant\sigma_i\|\boldsymbol{D}_L\|_{\mathrm{F}}\|\boldsymbol{D}\|_{\mathrm{F}} \tag{8.6.12}$$

定理 8.6.4 [144] 令 $\boldsymbol{B}+\delta\boldsymbol{B}=\boldsymbol{D}_L\boldsymbol{B}\boldsymbol{D}_R$，其中，$\boldsymbol{D}_R$ 和 $\boldsymbol{D}_L$ 为非奇异矩阵，并定义

$$\bar{\beta}\stackrel{\text{def}}{=}\max\{\|\boldsymbol{D}_L^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}},\|\boldsymbol{D}_R-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}}\},\quad \bar{\gamma}\stackrel{\text{def}}{=}\max\{\|\boldsymbol{D}_L\boldsymbol{D}_L^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}},\|\boldsymbol{D}_R^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_R-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}}\}$$

和

$$\bar{\beta}\stackrel{\text{def}}{=}\max\{\|\boldsymbol{D}_L\boldsymbol{D}_L^{\mathrm{T}}\|_{\mathrm{F}},\|\boldsymbol{D}_R^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_R\|_{\mathrm{F}}\}\max\{\|\boldsymbol{D}_L^{-1}\boldsymbol{D}_L^{-\mathrm{T}}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}},\|\boldsymbol{D}_R^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{D}_R^{-1}-\boldsymbol{I}\|_{\mathrm{F}}\}$$

于是有

$$|\sigma_i'-\sigma_i|\leqslant\bar{\gamma}\sigma_i \tag{8.6.13}$$

并且若 $\bar{\rho}_i>\bar{\gamma}$，则

$$\max\{\sin\theta_i^u,\sin\theta_i^v\}\leqslant\sqrt{2}\left(\frac{\bar{\delta}}{\bar{\rho}_i-\bar{\gamma}}+\bar{\beta}\right) \tag{8.6.14}$$

式 (8.6.13) 表明，扰动引起的奇异值相对变化由 $\boldsymbol{D}_L$ 和 $\boldsymbol{D}_R$ 偏离半正交矩阵的那个最大离差决定。

8.7 特征值分解的几种典型应用

特征值分解有着广泛的应用。本节以信号处理和模式识别中的问题为例，介绍几个典型的应用：标准正交变换、迷向圆变换、Pisarenko 谐波分解、主分量分析以及降秩 Wiener 滤波。

8.7.1 标准正交变换与迷向圆变换

给定一组彼此相关的随机变量，常常希望通过线性变换，把它变换成另外一组统计不相关的随机变量。甚至更进一步，希望变换后的一组统计不相关随机变量各个分量还具有单位方差。这两个任务可以通过标准正交变换和迷向圆变换分别完成。

令 $\boldsymbol{x}$ 为一 $m\times 1$ 随机向量，其均值向量为 $\boldsymbol{m}_x$，协方差矩阵为 $\boldsymbol{C}_x$。

首先，使用线性变换 $\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{m}_x$ 将 $\boldsymbol{x}$ 变成零均值的随机向量 $\boldsymbol{x}_0$，这是信号处理和模式识别通常采用的一种预处理。此时，随机向量 $\boldsymbol{x}_0$ 的自相关矩阵与 $\boldsymbol{x}$ 的协方差矩阵相同，即 $\boldsymbol{R}_{x_0}=\boldsymbol{C}_x$。

1. 标准正交变换

令 $\boldsymbol{C}_x$ 的特征值分解为

$$\boldsymbol{C}_x=\boldsymbol{U}_x\boldsymbol{\Sigma}_x\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}} \tag{8.7.1}$$

利用 $\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}$ 对 $\boldsymbol{x}_0$ 进行线性变换，其结果为

$$\boldsymbol{w}=\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{m}_x) \tag{8.7.2}$$

于是，变换结果 $\boldsymbol{w}$ 的均值向量

$$\boldsymbol{m}_w=\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}_0\}=\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}-\boldsymbol{m}_x\}=\boldsymbol{0} \tag{8.7.3}$$

且 $\boldsymbol{w}$ 的协方差矩阵

$$\begin{aligned}\boldsymbol{C}_w=\boldsymbol{R}_w&=\mathrm{E}\{\boldsymbol{w}\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_0\boldsymbol{x}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_x\}=\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_{x_0}\boldsymbol{U}_x\\&=\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_x\boldsymbol{U}_x=\boldsymbol{\Sigma}_x\end{aligned} \tag{8.7.4}$$

式中，使用了前面的结果 $\boldsymbol{R}_{x_0}=\boldsymbol{C}_x$。

由于 $\boldsymbol{\Sigma}_x$ 是对角矩阵，故 $\boldsymbol{C}_w$ 也是对角矩阵。

总结以上讨论，使用特征值分解的线性变换 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{U}_x\boldsymbol{x}_0=\boldsymbol{U}_x(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{m}_x)$ 具有以下有趣的性质 [298]：

(1) 随机向量 $\boldsymbol{w}$ 具有零均值，各个分量彼此统计不相关 (因而正交)。进一步地，若 $\boldsymbol{x}$ 是具有均值向量 $\boldsymbol{m}_x$ 和协方差矩阵 $\boldsymbol{C}_x$ 的正态或高斯分布 $N(\boldsymbol{m}_x, \boldsymbol{C}_x)$，则 $\boldsymbol{w}$ 是一个具有零均值向量和协方差矩阵为对角矩阵的正态分布 $N(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{\Sigma}_x)$，即它的各个分量相互统计独立 (注：对于具有零均值向量的正态或高斯随机向量，正交、统计不相关和统计独立三者等价)。

(2) 随机变量 $w_i(i = 1, 2, \cdots, m)$ 的方差等于协方差矩阵 $\boldsymbol{C}_x$ 的特征值。

(3) 由于线性变换矩阵 $\boldsymbol{U}_x$ 是标准正交矩阵，所以线性变换 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_0$ 称为标准正交变换 (orthonormal transformation)，且距离函数的平方

$$d^2(\boldsymbol{x}_0) \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{x}_0^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_{x_0}^{-1}\boldsymbol{x}_0 = (\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_x)\boldsymbol{\Sigma}_x^{-1}\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_x^{-1}\boldsymbol{x} = d^2(\boldsymbol{x}) \tag{8.7.5}$$

在标准正交变换下保持不变。距离测度 $d^2(\boldsymbol{x}) = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_x^{-1}\boldsymbol{x}$ 称为 Mahalanobis 距离。在正态随机向量的情况下，Mahalanobis 距离与对数似然函数有关。

2. 迷向圆变换

在上面的标准正交变换中，线性变换 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_0$ 的自相关矩阵 (与协方差矩阵相等) $\boldsymbol{R}_x$ 为对角矩阵，但不是单位矩阵 $\boldsymbol{I}$。要使 $\boldsymbol{w}$ 的自相关矩阵为单位矩阵，就需要对 $\boldsymbol{w}$ 再作另一个线性变换

$$\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2}\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_0 = \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2}\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{m}_x) \tag{8.7.6}$$

由上式和式 (8.7.4)，得

$$\boldsymbol{R}_y = \mathrm{E}\{\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\} = \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2}\boldsymbol{C}_w\boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2} = \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2}\boldsymbol{\Sigma}_x\boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2} = \boldsymbol{I}$$

线性变换 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2}\boldsymbol{w} = \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2}\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_0$ 称为迷向圆变换 (isotropic circular transformation)，因为向量 $\boldsymbol{y}$ 的所有分量都是零均值的、具有单位方差的统计不相关随机变量。图 8.7.1 画出了二维情况下迷向圆变换的几何解释 [298]。

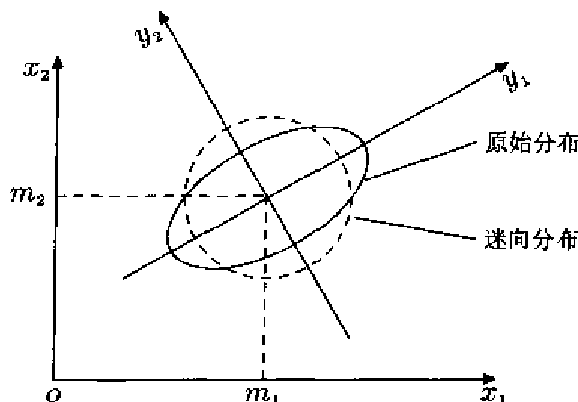


图 8.7.1　迷向圆变换的几何解释

图 8.7.1 清楚地表明，在迷向圆变换中不仅存在坐标轴的平移和旋转，而且还存在坐

标轴的伸缩。结果是，向量 $\boldsymbol{y}$ 的分布变成了圆周型的分布，在所有方向上都相同，即分布是方向不变的。这样一种分布称为各向同性分布或迷向分布 (isotropic distribution)。

从图 8.7.1 可以看出，以二维向量 $\boldsymbol{x} = \overrightarrow{AB} = (a,b)$ 为例，经过标准正交变换 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{U}_x(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{m}_x)$ 后，描述 $\boldsymbol{w}$ 的新坐标系具有以下几何特点：

(1) 新坐标系是描述向量 $\boldsymbol{x}$ 的原坐标系的平移，即原点从 $(0,0)$ 平移至 (a,b)。

(2) 新坐标系是原坐标系的旋转。

总结以上讨论，可以得出迷向圆变换所具有的重要性质：

(1) 经过迷向圆变换之后，自相关矩阵变成单位矩阵。这意味着，迷向圆变换得到的随机向量的所有分量具有单位方差，而且彼此统计不相关。

(2) 对具有零均值向量的随机向量 $\boldsymbol{x}_0$ 所进行的迷向圆变换 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2}\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_0$ 的矩阵 (称为迷向圆变换矩阵) $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{\Sigma}_x^{-1/2}\boldsymbol{U}_x^{\mathrm{H}}$ 是正交的，但不是标准正交的。

(3) Mahalanobis 距离 $d^2(\boldsymbol{x}_0)$ 在迷向圆变换下不能保持不变。即是说，$d^2(\boldsymbol{y}) \neq d^2(\boldsymbol{x}_0)$。

下面从信号处理的观点观看标准正交变换和迷向圆变换。

若将 m 个相关的零均值随机过程 $\{x_1(n), x_2(n), \cdots, x_m(n)\}$ 视为一随机向量 $\boldsymbol{x}(n) = [x_1(n), x_2(n), \cdots, x_m(n)]^{\mathrm{T}}$，则随机向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 的标准正交变换等价于将 m 个相关的随机过程 $x_1(n), x_2(n), \cdots, x_m(n)$ 分别变换为白 (色) 噪声过程，简称 (预) 白化。在这类情况下，m 个白噪声过程具有不同的方差。

对随机向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 进行迷向圆变换时，m 个相关随机过程 $x_1(n), x_2(n), \cdots, x_m(n)$ 分别白化为具有单位方差的白噪声，常称标准白化。

因此，若将数学语言翻译成信号处理语言，即有：m 维随机向量的标准正交变换和迷向圆变换分别是 m 个随机过程的白化和标准白化。白化或标准白化是信号处理中经常使用的预处理手段。

例 8.7.1 考虑 1.9.2 节列举过的盲信号分离问题 $\boldsymbol{x}(n) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}(n)$，其目的是只使用 $\boldsymbol{x}(1), \boldsymbol{x}(2), \cdots, \boldsymbol{x}(N)]^{\mathrm{T}}$ 恢复原统计独立的信号源向量 $\boldsymbol{s}(n) = [s_1(n), s_2(n), \cdots, s_m(n)]^{\mathrm{T}}$。由于盲分离的不确定性，分离出来的 m 个随机信号的排序可能发生变化，每个信号的幅值也会相差一个复数因子。盲信号分离的独立分量分析法和非线性主分量分析法中，都需要对观测数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 作适当的线性变换，使得变换后的向量中的各个分量统计独立或者尽可能统计独立。对观测数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 进行预先白化，对实现统计独立是非常有用的。这是因为，m 个相关随机过程白化后，彼此统计不相关，而统计不相关是统计独立的必要条件。另外，由于各个信号源都假设为单位方差，所以很自然地希望 m 个白化后的随机过程 (即白噪声过程) 都具有单位方差。鉴于此，对观测随机过程进行标准白化，已成为盲信号分离的一种重要的预处理手段。

8.7.2 Pisarenko 谐波分解

谐波过程在很多工程应用中会经常遇到，并需要确定这些谐波的频率和功率 (合称谐

波恢复)。谐波恢复的关键任务是估计谐波的个数及频率。下面介绍谐波恢复的 Pisarenko 谐波分解方法，它是俄罗斯数学家 Pisarenko 提出的 [368]。

考虑由 p 个实正弦波组成的谐波过程

$$x(n) = \sum_{i=1}^{p} A_i \sin(2\pi f_i n + \theta_i) \tag{8.7.7}$$

当相位 θ_i 为常数时，上述谐波过程是一确定性过程，它是非平稳的。为了保证谐波过程的平稳性，通常假定相位 θ_i 是在 $[-\pi, \pi]$ 内均匀分布的随机数。此时，谐波过程是一随机过程。

谐波过程可以使用差分方程描述。先考虑单个正弦波的情况。为简单计，令谐波信号 $x(n) = \sin(2\pi f n + \theta)$。回忆三角函数恒等式

$$\sin(2\pi f n + \theta) + \sin[2\pi f(n-2) + \theta] = 2\cos(2\pi f)\sin[2\pi f(n-1) + \theta]$$

若将 $x(n) = \sin(2\pi f n + \theta)$ 代入上式，便得到二阶差分方程

$$x(n) - 2\cos(2\pi f)x(n-1) + x(n-2) = 0$$

对上式作 Z 变换，得

$$[1 - 2\cos(2\pi f)z^{-1} + z^{-2}]X(z) = 0$$

于是，得到特征多项式

$$1 - 2\cos(2\pi f)z^{-1} + z^{-2} = 0$$

它有一对共轭复数根，即

$$z = \cos(2\pi f) \pm \mathrm{j}\,\sin(2\pi f) = \mathrm{e}^{\pm \mathrm{j}\,2\pi f}$$

注意，共轭根的模为 1，即 $|z_1| = |z_2| = 1$。由特征多项式的根可决定正弦波的频率，即有

$$f_i = \arctan[\mathrm{Im}(z_i)/\mathrm{Re}(z_i)]/2\pi \tag{8.7.8}$$

通常，只取正的频率。显然，如果 p 个实的正弦波信号没有重复频率的话，则这 p 个频率应该由特征多项式

$$\prod_{i=1}^{p}(z - z_i)(z - z_i^*) = \sum_{i=0}^{2p} a_i z^{2p-i} = 0$$

或

$$1 + a_1 z^{-1} + \cdots + a_{2p-1} z^{-(2p-1)} + z^{-2p} = 0 \tag{8.7.9}$$

的根决定。易知，这些根的模全部等于 1。由于所有根都是以共轭对的形式出现，所以特征多项式 (8.7.9) 的系数存在对称性，即

$$a_i = a_{2p-i}, \quad i = 0, 1, \cdots, p \tag{8.7.10}$$

与式 (8.7.10) 对应的差分方程为

$$x(n)+\sum_{i=1}^{2p}a_i x(n-i)=0 \tag{8.7.11}$$

正弦波过程一般是在加性白噪声中被观测的，设加性白噪声为 $e(n)$，即观测过程

$$y(n)=x(n)+e(n)=\sum_{i=1}^{p}A_i\sin(2\pi f_i n+\theta_i)+e(n) \tag{8.7.12}$$

式中，$e(n)\sim N(0,\sigma_e^2)$ 为高斯白噪声，它与正弦波信号 $x(n)$ 统计独立。将 $x(n)=y(n)-e(n)$ 代入式 (8.7.11)，立即得到白噪声中的正弦波过程所满足的差分方程

$$y(n)+\sum_{i=1}^{2p}a_i y(n-i)=e(n)+\sum_{i=1}^{2p}a_i e(n-i) \tag{8.7.13}$$

这是一个特殊的自回归 - 滑动平均 (ARMA) 过程，不仅自回归 (AR) 阶数与滑动平均 (MA) 阶数相等，而且 AR 参数也与 MA 参数完全相同。

现在推导这一特殊 ARMA 过程的 AR 参数满足的法方程。为此，定义向量

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{y}(n)&=[y(n),y(n-1),\cdots,y(n-2p)]^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{w}&=[1,a_1,\cdots,a_{2p}]^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{e}(n)&=[e(n),e(n-1),\cdots,e(n-2p)]^{\mathrm{T}}\end{aligned}\right\} \tag{8.7.14}$$

于是，式 (8.7.13) 可写成

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(n)\boldsymbol{w}=\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}(n)\boldsymbol{w} \tag{8.7.15}$$

用向量 $\boldsymbol{y}(n)$ 左乘式 (8.7.15)，并取数学期望，即得

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{y}(n)\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(n)\}\boldsymbol{w}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{y}(n)\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}(n)\}\boldsymbol{w} \tag{8.7.16}$$

令 $R_y(k)=\mathrm{E}\{y(n+k)y(n)\}$ 表示观测数据 $y(n)$ 的自相关函数，则

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{y}(n)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(n)\}=\begin{bmatrix}R_y(0)&R_y(-1)&\cdots&R_y(-2p)\\R_y(1)&R_y(0)&\cdots&R_y(-2p+1)\\\vdots&\vdots&&\vdots\\R_y(2p)&R_y(2p-1)&\cdots&R_y(0)\end{bmatrix}\stackrel{\text{def}}{=}\boldsymbol{R}$$

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{y}(n)\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}(n)\}=\mathrm{E}\{[\boldsymbol{x}(n)+\boldsymbol{e}(n)]\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}(n)\}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}(n)\boldsymbol{e}^{\mathrm{T}}(n)\}=\sigma_e^2\boldsymbol{I}$$

其中，使用了 $x(n)$ 与 $w(n)$ 统计独立的假设。将以上两个关系式代入式 (8.7.16)，便得到一个重要的法方程

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{w}=\sigma_e^2\boldsymbol{w} \tag{8.7.17}$$

这表明，σ_e^2 是观测过程 $\{y(n)\}$ 的自相关矩阵 $\boldsymbol{R}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{y}(n)\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(n)\}$ 的特征值，而特征多项式的系数向量 $\boldsymbol{w}$ 是对应于该特征值的特征向量。这就是 Pisarenko 谐波分解方法的理论基础。

注意，自相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的特征值 σ_e^2 是噪声 $e(n)$ 的方差，其他特征值则与各个谐波信号的功率对应。当信噪比比较大时，特征值 σ_e^2 明显小于其他特征值。因此，Pisarenko 谐波分解启迪我们，谐波恢复问题可以转化为自相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的特征值分解：谐波过程的特征多项式的系数向量 $\boldsymbol{w}$ 就是自相关矩阵中与最小特征值 σ_e^2 对应的那个特征向量。

8.7.3 离散 Karhunen-Loeve 变换

在许多信号处理和模式识别应用中，常常需要将随机信号的观测样本用另外一组数 (或系数) 表示，同时使这种新的表示具有某些所希望的性质。例如，对于编码而言，希望信号可以用少数系数表示，同时这些系数集中了原信号的能量。又如，对于最优滤波，则希望变换后的样本统计不相关，这样就可以降低滤波器的复杂度，或者提高信噪比。实现上述目标的通用做法是将信号展开成正交基函数的线性组合，使得信号相对于基函数的各个分量不会相互干扰。

如果正交基函数根据信号观测样本的协方差矩阵适当选择，就有可能在所有正交基函数中，获得具有最小均方误差的信号表示。在均方误差最小的意义上，这样一种信号表示是最优的信号表示，它在随机信号的分析与编码中具有重要的意义和应用。这种信号变换是 Karhunen 和 Loeve 针对连续随机信号提出的，称为 Kauhunen-Loeve 变换。后来，Hotelling 把它推广到离散随机信号，所以也叫 Hotelling 变换。不过，在大多数文献中，仍习惯称之为离散 Karhunen-Loeve 变换。

令 $\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_M]^{\mathrm{T}}$ 是一零均值的随机向量，其自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x=\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\}$。现在，希望使用线性变换

$$\boldsymbol{w}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} \tag{8.7.18}$$

其中，$\boldsymbol{Q}$ 是一酉矩阵，即 $\boldsymbol{Q}^{-1}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}$。于是，原随机信号向量 $\boldsymbol{x}$ 可以用线性正交变换矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 表示成 $\boldsymbol{w}$ 的线性组合，即

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{w}=\sum_{i=1}^{M}w_i\boldsymbol{q}_i,\quad \boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{q}_j=0,\quad i\neq j \tag{8.7.19}$$

为了减小变换后的系数 w_i 的个数，假定在上式中只使用 $\boldsymbol{w}$ 的前 m 个系数 $w_1,w_2,\cdots,w_m(m=1,2,\cdots,M)$ 逼近随机信号向量 $\boldsymbol{x}$，即

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\sum_{i=1}^{m}w_i\boldsymbol{q}_i,\quad 1\leqslant m\leqslant M \tag{8.7.20}$$

于是，随机信号向量的 m 阶逼近的误差由

$$\boldsymbol{e}_m=\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}=\sum_{i=1}^{M}w_i\boldsymbol{q}_i-\sum_{i=1}^{m}w_i\boldsymbol{q}_i=\sum_{i=m+1}^{M}w_i\boldsymbol{q}_i \tag{8.7.21}$$

给出。由此可以得到均方误差

$$E_m=\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_m\}=\sum_{i=m+1}^{M}\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}}\mathrm{E}\{|w_i|^2\}\boldsymbol{q}_i=\sum_{i=m+1}^{M}\mathrm{E}\{|w_i|^2\}\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{q}_i \tag{8.7.22}$$

由 $w_i = \boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{x}$ 易知 $\mathrm{E}\{|w_i|^2\} = \boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{q}_i$。若进一步约束 $\boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{q}_i = 1$，则式 (8.7.22) 表示的均方误差可以重新写为

$$E_m = \sum_{i=m+1}^{M} \mathrm{E}\{|w_i|^2\} = \sum_{i=m+1}^{M} \boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{q}_i \tag{8.7.23}$$

约束条件为

$$\boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{q}_i = 1, \quad i = m+1, m+2, \cdots, M$$

为了使均方误差最小化，使用 Lagrange 乘数法构造代价函数

$$J = \sum_{i=m+1}^{M} \boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{q}_i + \sum_{i=m+1}^{M} \lambda_i(1 - \boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{q}_i),$$

令 $\dfrac{\partial J}{\partial \boldsymbol{q}_i^*} = 0,\ i = m+1, m+2, \cdots, M$，即

$$\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{q}_i^*}\left[\sum_{i=m+1}^{M} \boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{q}_i + \sum_{i=m+1}^{M} \lambda_i(1 - \boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{q}_i)\right] = \boldsymbol{R}_x\boldsymbol{q}_i - \lambda_i\boldsymbol{q}_i = 0$$
$$i = m+1, m+2, \cdots, M \tag{8.7.24}$$

即得

$$\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{q}_i = \lambda_i\boldsymbol{q}_i, \quad i = m+1, m+2, \cdots, M \tag{8.7.25}$$

这一变换称为 Karhunen-Loeve 变换。

上述讨论说明，当使用式 (8.7.20) 逼近一个随机信号向量 $\boldsymbol{x}$ 时，为了使逼近的均方误差为最小，应该选择 Lagrange 乘数 λ_i 和代价函数中的正交基向量 $\boldsymbol{g}_i$ 分别是信号自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x$ 后面的 $M-m$ 个特征值和特征向量。换言之，式 (8.7.20) 中用作随机信号向量的正交基应该是 $\boldsymbol{R}_x$ 的前 m 个特征向量。

令 $M \times M$ 自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x$ 的特征值分解为

$$\boldsymbol{R}_x = \sum_{i=1}^{M} \lambda_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\rm H} \tag{8.7.26}$$

因此，式 (8.7.20) 中被选择的正交基为 $\boldsymbol{g}_i = \boldsymbol{u}_i,\ i = 1, 2, \cdots, m$。

如果自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x$ 只有 K 个大特征值，并且其他 $M-K$ 个特征值可以忽略，则式 (8.7.20) 中信号逼近的阶数应该取 $m = K$，从而得到信号的 K 阶离散 Kauhunen-Loeve 展开式

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \sum_{i=1}^{K} w_i\boldsymbol{u}_i \tag{8.7.27}$$

其中，$w_i, i = 1, 2, \cdots, K$ 是 $K \times 1$ 向量

$$\boldsymbol{w} = \boldsymbol{U}_1^{\rm H}\boldsymbol{x} \tag{8.7.28}$$

的第 i 个元素。式中，$\boldsymbol{U}_1=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_K]$ 由自相关矩阵中与 K 个大特征值对应的特征向量组成。此时，K 阶离散 Karhunen-Loeve 展开的均方误差为

$$E_K=\sum_{i=K+1}^{M}\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{u}_i=\sum_{i=K+1}^{M}\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\left(\sum_{j=1}^{M}\lambda_j\boldsymbol{u}_j\boldsymbol{u}_j^{\mathrm{H}}\right)\boldsymbol{u}_i=\sum_{i=K+1}^{M}\lambda_i \tag{8.7.29}$$

由于 $\lambda_i, i=K+1,K+2,\cdots,M$ 都是自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x$ 的次特征值，均方误差 E_K 很小。

如果原数据 $x_1,x_2,\cdots,x_M$ 是需要发射的 M 个数据。在发射端直接发射这些数据，会带来两个问题：这些数据很容易被他人接收；在很多情况下，数据长度 M 可能很大。例如，一幅图像需要先按行转换为数据，然后将各行的数据合成一个很长的数据段。利用离散 Karhunen-Loeve 展开，则可以避免直接发射原数据的这两个缺陷。假定需要发送的图像或者语音信号的 M 个离散样本为 $x_c(0),x_c(1),\cdots,x_c(M-1)$，其中，$M$ 很大。如果分析给定数据 $x_c(0),x_c(1),\cdots,x_c(M-1)$ 的自相关矩阵，并确定其最大特征值个数 K，就可以得到 K 个线性变换系数 $w_1,w_2,\cdots,w_K$ 和 K 个正交的特征向量 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_K$。这样，就只需要在发射端发射 K 个系数 $w_1,w_2,\cdots,w_K$。如果在接收端有这 K 个特征向量的信息，则可利用

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\sum_{i=1}^{K}w_i\boldsymbol{u}_i \tag{8.7.30}$$

重构被发射的 M 个数据 $x_c(i), i=0,1,\cdots,M-1$。

将 M 个信号数据 $x_c(0),x_c(1),\cdots,x_c(M-1)$ 变换成 K 个系数 $w_1,w_2,\cdots,w_K$ 的过程称为信号编码或数据压缩；而从这 K 个系数重构 M 个信号数据的过程则称为信号解码。图 8.7.2 画出了信号编码和解码的原理图。

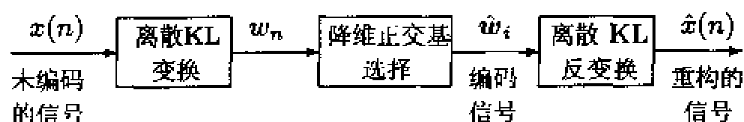


图 8.7.2 利用离散 Karhunen-Loeve 变换的信号编码和解码原理图

比率 M/K 称为压缩比。若 K 比 M 小得多时，即可得到大的压缩比。显然，经过离散 Karhunen-Loeve 变换对原数据进行编码后，不仅可以大大压缩发射数据的长度，而且即使 K 个编码系数被他人接收，由于没有 K 个特征向量的信息，他人也不可能准确重构原数据。

8.7.4 主分量分析

假定有 P 个统计相关的性质指标集合 $\{x_1,x_2,\cdots,x_P\}$。由于它们之间的相关性，在这 P 个性质指标中存在信息的冗余。现在希望通过正交变换，从中获得 K 个新特征集合 $\{\tilde{x}_1,\tilde{x}_2,\cdots,\tilde{x}_K\}$。这些新特征相互正交。由于彼此正交，新特征之间不再有信息的冗余。这一过程称为特征提取。从空间变换的角度，特征提取的实质就是从 P 个原始变量的 C^P

空间内，提取出彼此正交的 K 个新变量，组成 C^K 空间。将一个存在信息冗余的多维空间变成一个无信息冗余的较低维空间，这样一种线性变换称为降维 (reduced dimension)。

作为降维处理的一个典型例子，下面介绍主分量分析 (principal component analysis，PCA)。

1\. 单信道情况

通过正交变换，可以将存在统计相关的 P 个原始性质指标变成 P 个彼此正交的新的性质指标。在这 P 个新的性质指标中，具有较大能量的 K 个性质指标可以视为 P 个原始性质指标的主要成分，简称主分量或者主成分。另外 $P-K$ 个具有很小能量的性质指标则称为次分量。只利用数据向量的 K 个主分量进行的数据或者信号分析称为主分量分析。反之，基于次分量的信号分析、系统分析或模式分析则统称为次分量分析 (minor component analysis，MCA)。

主分量分析的主要目的是用 K ($K<P$) 个主分量概括表达统计相关的 P 个变量。为了全面反映 P 个原始变量所携带的有用信息，每一个主分量都应该是 P 个原始变量的线性组合方式。

定义 8.7.1 令 $\boldsymbol{R}_x$ 是数据向量 $\boldsymbol{x}$ 的自相关矩阵，它有 K 个主特征值，与这些主特征值对应的 K 个特征向量称为数据向量 $\boldsymbol{x}$ 的主分量。

主分量分析的主要步骤及思想如下。

降维：将 P 个变量综合成 K 个主分量

$$\tilde{x}_j=\sum_{i=1}^{P}a_{ij}^*x_i=\boldsymbol{a}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x},\qquad j=1,2,\cdots,K \tag{8.7.31}$$

式中，$\boldsymbol{a}_j=[a_{1j},a_{2j},\cdots,a_{Pj}]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{x}=[x_1,x_2,\cdots,x_P]^{\mathrm{T}}$。

正交化：欲使主分量正交归一，即

$$\langle\tilde{x}_i,\tilde{x}_j\rangle=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_j=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases}$$

必须选择系数向量 $\boldsymbol{a}_i$ 满足正交归一条件

$$\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}_j=\begin{cases}1, & i=j\\ 0, & i\neq j\end{cases} \tag{8.7.32}$$

因为 $\boldsymbol{x}$ 各个元素统计相关，即 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\neq 0$。

能量最大化：若选择 $\boldsymbol{a}_i=\boldsymbol{u}_i,\ i=1,2,\cdots,K$，其中，$\boldsymbol{u}_i(i=1,2,\cdots,K)$ 是自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x=\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\}$ 与 K 大特征值 $\lambda_1\geqslant\lambda\geqslant\cdots\geqslant\lambda_K$ 对应的特征向量，则容易计算出各

个无冗余分量的能量为

$$\begin{aligned} E_{\tilde{x}_i} &= \mathrm{E}\{|\tilde{x}_i|^2\} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}(\boldsymbol{a}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})^*\} = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i\} = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_x\boldsymbol{u}_i \\ &= \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_P]\begin{bmatrix} \lambda_1 & & & 0 \\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_P \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{u}_2^{\mathrm{H}} \\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_P^{\mathrm{H}} \end{bmatrix}\boldsymbol{u}_i \\ &= \lambda_i \end{aligned}$$

由于特征值按照非降顺序排列，故

$$E_{\tilde{x}_1} \geqslant E_{\tilde{x}_2} \geqslant \cdots \geqslant E_{\tilde{x}_k} \tag{8.7.33}$$

因此，按照能量的大小，常称 $\tilde{x}_1$ 为第一主分量，$\tilde{x}_2$ 为第二主分量，等等。

注意到 $P \times P$ 自相关矩阵

$$\boldsymbol{R}_x = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\} = \begin{bmatrix} \mathrm{E}\{|x_1|^2\} & \mathrm{E}\{x_1x_2^*\} & \cdots & \mathrm{E}\{x_1x_P^*\} \\ \mathrm{E}\{x_2x_1^*\} & \mathrm{E}\{|x_2|^2\} & \cdots & \mathrm{E}\{x_2x_P^*\} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \mathrm{E}\{x_Px_1^*\} & \mathrm{E}\{x_Px_2^*\} & \cdots & \mathrm{E}\{|x_P|^2\} \end{bmatrix} \tag{8.7.34}$$

利用矩阵迹的定义和性质知

$$\mathrm{tr}(\boldsymbol{R}_x) = \mathrm{E}\{|x_1|^2\} + \mathrm{E}\{|x_2|^2\} + \cdots + \mathrm{E}\{|x_P|^2\} = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_P \tag{8.7.35}$$

但是，若自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_x$ 只有 K 个大的特征值，则有

$$\mathrm{E}\{|x_1|^2\} + \mathrm{E}\{|x_2|^2\} + \cdots + \mathrm{E}\{|x_P|^2\} \approx \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_K \tag{8.7.36}$$

总结以上讨论，可以得出结论：主分量分析的基本思想是，通过降维、正交化和能量最大化这三个步骤，将原来统计相关的 P 个随机数据变换成 K 个相互正交的主分量，这些主分量的能量之和近似等于原 P 个随机数据的能量之和。

2\. 多信道情况

在很多应用中，往往可以获得 M 个信道的观察数据，我们希望从中提取某些信号的共同特征。这些特征作为模式向量，可供信号分类之用。例如，从多信道脑电记录和心电记录中，分别提取正常心脑血管人群和不同类型病人的共同特征，即可用于心脑血管病的分类。

假定 M 信道的观测数据序列为 $\{x_m(n)\}$，$m = 1, 2, \cdots, M, n = 1, 2, \cdots, N$ (N 为观测数据长度)。由于每个信道的数据 $x_m(1), x_m(2), \cdots, x_m(N)$ 是通过不同位置的传感器观测的，所以常把这样的观测数据称为空间信号，其相关矩阵称为空间相关矩阵。不失一般性，假定这些观测数据已经过零均值化的预处理。定义 $M \times N$ 观测数据矩阵

$$\boldsymbol{X} = \begin{bmatrix} x_1(1) & x_1(2) & \cdots & x_1(N) \\ x_2(1) & x_2(2) & \cdots & x_2(N) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x_M(1) & x_M(2) & \cdots & x_M(N) \end{bmatrix} = [\boldsymbol{x}(1), \boldsymbol{x}(2), \cdots, \boldsymbol{x}(N)] \tag{8.7.37}$$

式中，$\boldsymbol{x}(n)=[x_1(n),x_2(n),\cdots,x_M(n)]^{\mathrm{T}}$ 是由所有 M 个信道的空间信号组成的向量。令 $M\times M$ 空间相关矩阵的特征值分解为

$$\boldsymbol{R}=\frac{1}{N}\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \tag{8.7.38}$$

现在希望从观测数据中提取表示共性的特征 $\phi_k(n),\ k=1,2,\cdots,M,\ n=1,2,\cdots,N$，使得原观测数据是这些特征的线性组合，即

$$x_m(n)=\sum_{k=1}^{M}a_{mk}\phi_k(n),\quad m=1,2,\cdots,M,\ n=1,2,\cdots,N \tag{8.7.39}$$

或用矩阵形式写作

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi} \tag{8.7.40}$$

式中

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1M}\\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2M}\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ a_{M1} & a_{M2} & \cdots & a_{MM}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{\Phi}=\begin{bmatrix}\phi_1(1) & \phi_1(2) & \cdots & \phi_1(N)\\ \phi_2(1) & \phi_2(2) & \cdots & \phi_2(N)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \phi_M(1) & \phi_M(2) & \cdots & \phi_M(N)\end{bmatrix}$$

分别是展开系数矩阵和表示 M 信道信号特征的矩阵。

在观测数据的展开式 (8.7.39) 中，要求提取的特征满足正交和归一化条件，即

$$\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\phi_m(n)\phi_k(n)=\delta(m-k)=\begin{cases}1, & m=k\\ 0, & m\neq k\end{cases} \tag{8.7.41}$$

或写作

$$\frac{1}{N}\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I} \tag{8.7.42}$$

利用式 (8.7.38) 和式 (8.7.42)，容易求得

$$\boldsymbol{R}=\frac{1}{N}\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}=\frac{1}{N}\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} \tag{8.7.43}$$

另一方面，由于空间相关矩阵是对称矩阵，其特征值不可能为负数，故存在 $\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}$，即有

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}} \tag{8.7.44}$$

比较式 (8.7.43) 和式 (8.7.44)，立即得到系数矩阵的表达式

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\quad \text{或}\quad a_{mk}=\sqrt{\lambda_k}u_{mk} \tag{8.7.45}$$

式中，λ_k 和 $\boldsymbol{u}_m=[u_{m1},u_{m2},\cdots,u_{mN}]^{\mathrm{T}}$ 分别是空间相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的特征值和对应的特征向量。用矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 左乘观测数据展开式 $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi}$，并利用式 (8.7.45)，易知

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{\Phi}$$

即有

$$\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1}(\boldsymbol{\Sigma}^{1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{X} = \boldsymbol{\Sigma}^{-1/2}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X} \tag{8.7.46}$$

书写成列向量形式，有

$$\begin{aligned}\begin{bmatrix}\phi_1(n)\\ \phi_2(n)\\ \vdots \\ \phi_M(n)\end{bmatrix} &= \begin{bmatrix}\lambda_1^{-1/2} & & & 0\\ & \lambda_2^{-1/2} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_M^{-1/2}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{u}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots \\ \boldsymbol{u}_M\end{bmatrix}\boldsymbol{x}(n)\\ &= \begin{bmatrix}\lambda_1^{-1/2}\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(n)\\ \lambda_2^{-1/2}\boldsymbol{u}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(n)\\ \vdots \\ \lambda_M^{-1/2}\boldsymbol{u}_M\boldsymbol{x}(n)\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{8.7.47}$$

即有

$$\phi_m(n) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_m}}\boldsymbol{u}_m^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(n), \qquad m = 1, 2, \cdots, M \tag{8.7.48}$$

计算每个信道观测信号的功率，并利用正交关系式 (8.7.41)，得

$$\begin{aligned}P_m &= \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N} x_m^2(n) = \frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\left(\sum_{k=1}^{M}\sum_{j=1}^{M} a_{mk}a_{mj}\phi_k(n)\phi_j(n)\right)\\ &= \sum_{k=1}^{M}\sum_{j=1}^{M} a_{mk}a_{mj}\left(\frac{1}{N}\sum_{n=1}^{N}\phi_m(n)\phi_j(n)\right) = \sum_{k=1}^{M} a_{mk}^2\end{aligned} \tag{8.7.49}$$

式 (8.7.49) 有两层重要的涵义：

(1) 由空间信号展开式 $x_m(n) = \sum_{k=1}^{M} a_{mk}\phi_k(n)$ 可以看出，第 m 个信道空间信号的展开系数 a_{mk} 与第 k 个特征子波 $\phi_k(n)$ 相对应。因此，式 (8.7.49) 反映了第 k 个特征子波 $\phi_k(n)$ 对 $m = 1, 2, \cdots, M$ 个信道的空间信号的功率总贡献。

(2) 由式 (8.7.49) 和式 (8.7.45) 有

$$P_m = \sum_{k=1}^{M} a_{mk}^2 = \lambda_m \sum_{k=1}^{N} u_{mk}^2 = \lambda_m \tag{8.7.50}$$

即空间相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的第 m 个特征值反映了第 m 个特征子波 $\phi_m(n)$ 在功率中的贡献。

综合以上讨论，可以得出结论：从功率观点看，只有与比较大的特征值 (主特征值) λ_m 相对应的特征子波 $\phi_m(n)$ 的功率贡献比较大，只选择这些特征子波便足够描述 M 个信道的空间信号。换言之，若空间相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 只有 p 个主特征值 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_p$，则只要提取 p 个特征子波 $\phi_1(n), \phi_2(n), \cdots, \phi_p(n)$ 即可。此时，观测信号展开式为

$$x_m(n) = \sum_{k=1}^{p} a_{mk}\phi_k(n), \quad m = 1, 2, \cdots, M,\ n = 1, 2, \cdots, N \tag{8.7.51}$$

此方法称为信号的主分量分析。观测数据向量的协方差矩阵的主分量分析是 Hotelling[226] 于 1933 年，Eckart 与 Young[140] 于 1936 年先后发展的。

需要注意的是，在上述主分量分析中，主分量的概念体现在以下两个方面：

(1) 式 (8.7.48) 表明，第 m 个特征子波 $\phi_m(n)$ 是空间信号向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 与空间相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的第 m 个特征向量 $\boldsymbol{u}_m$ 上的内积 $\boldsymbol{u}_m^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(n)$ 被特征值平方根的倒数 $1/\sqrt{\lambda_m}$ 加权的结果。内积 $\boldsymbol{u}_m^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(n)$ 相当于取出空间信号向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 与第 m 个特征向量 $\boldsymbol{u}$ 的共同部分，表示信号向量和第 m 个特征向量之间的共性。这就是为什么称 $\phi_m(n)$ 为表示共性的特征子波的原因。因此，特征子波 $\phi_m(n)$ 也可以理解为观测信号向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 本身与第 m 个特征向量相关联的主要分量即主分量。

(2) 在所有 M 个特征子波 $\phi_1(n),\phi_2(n),\cdots,\phi_M(n)$ 中，与 p 个主特征值对应的特征子波是所有 M 个特征子波中的主要部分。在信号的展开中，只使用这些主要的特征子波即可。

主分量分析可以给出被分析信号和图像的轮廓和主要信息。与之不同，次分量分析则可以提供信号的细节和图像的纹理。

定义 8.7.2[484] 令 $\boldsymbol{R}_{\boldsymbol{x}}$ 是数据向量 $\boldsymbol{x}$ 的自相关矩阵，它有 P 个次特征值 (即小特征值)，与这些次特征值对应的 P 个特征向量称为数据向量 $\boldsymbol{x}$ 的次分量。

只利用数据向量的 P 个次分量进行的数据或者信号分析称为次分量分析。次分量分析在很多领域中有着广泛的应用。例如，次分量分析已用于频率估计 [303],[304]、盲波束形成 [195]、动目标显示 [257]、杂波对消 [28] 等。在模式识别中，当主分量分析不能识别两个对象时，应进一步作次分量分析，比较它们所含信息的细节部分。

8.7.5 降秩 Wiener 滤波器

如果原始 N 维复空间 C^N 是由 N 个列向量张成的向量空间，则从向量空间 C^N 中获得由 M 个正交的基向量张成的向量子空间 C^M 的变换常称为降秩 (reduced rank)。术语“降秩”可以理解为由 N 个列向量组成的矩阵的有效秩的降低。

作为降秩的一个应用例子，下面介绍降秩 Wiener 滤波器 (reduced-rank Wiener filter) 的基本工作原理及实现方法。

考虑下面的滤波问题：$y(n)=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}(n)$，其中，$\boldsymbol{x}(n)=[x_1(n),x_2(n),\cdots,x_N(n)]^{\mathrm{T}}$ 为 $N\times 1$ 输入向量，$\boldsymbol{w}=[w_1,w_2,\cdots,w_N]^{\mathrm{T}}$ 为滤波器，有 N 个抽头。现在希望设计该滤波器，使其输出逼近期望输出 $d(n)$。

通常，$x_1(n),x_2(n),\cdots,x_N(n)$ 是 N 个相关的随机过程，$N\times N$ 自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_{xx}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\}$ 具有满秩 N。采用最小均方误差 (minimum mean-squared error，MMSE) 准则

$$\min J(n)=\min \mathrm{E}\{|d(n)-\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}(n)|^2\} \tag{8.7.52}$$

设计最优滤波器。由 $\dfrac{\partial J(n)}{\partial \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}}=0$ 易得最优滤波器为

$$\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}=\boldsymbol{R}_{xx}^{-1}\boldsymbol{r}_{xd} \tag{8.7.53}$$

式中，$\boldsymbol{r}_{xd} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}^*(n)d(n)\}$ 是输入向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 与标量期望输出之间的互相关向量。

基于 MMSE 准则的滤波器 $\boldsymbol{w}_{\text{opt}}$ 称为 Wiener 滤波器。由于滤波器的 $N \times N$ 自相关矩阵 $\boldsymbol{w}_{\text{opt}}\boldsymbol{w}_{\text{opt}}^{\mathrm{H}}$ 具有与 $\boldsymbol{R}_{xx}$ 相同的秩 N，为满秩矩阵，故 N 维 Wiener 滤波器 $\boldsymbol{w}_{\text{opt}} = \boldsymbol{R}_{xx}^{-1}\boldsymbol{r}_{xd}$ 称为全秩滤波器 (full-rank filter)。若 N 维 Wiener 滤波器 $\boldsymbol{w}_{\text{opt}}$ 由一个具有较低秩 $M < N$ 的自相关矩阵估计求得，则称这种 Wiener 滤波器为降秩 Wiener 滤波器。

降秩 Wiener 滤波器实现有三种常用的方法：

1. 预白化方法

先使用一个 $N \times M$ 白化滤波器，将 N 维观测数据向量 $\boldsymbol{x}$ 压缩为一个 M 维向量。与压缩数据向量对应的互相关向量 $\boldsymbol{r}_{xd}$ 和 Wiener 滤波器均变为 M 维向量。

2. 主分量分析法

令 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}(1), \boldsymbol{x}(2), \cdots, \boldsymbol{x}(L)]^{\mathrm{T}}$ 为 $L \times N$ 数据矩阵，其奇异值分解为

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{8.7.54}$$

式中，$\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 分别为 $L \times N$ 酉矩阵 (由左奇异向量构成) 和 $N \times N$ 酉矩阵 (由右奇异向量组成)；$\boldsymbol{\Sigma}$ 的对角元素为奇异值，按照 $\sigma_1 \geqslant \sigma_2 \geqslant \cdots \geqslant \sigma_N$ 顺序排列。由式 (8.7.54) 易求得样本自相关矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}_{xx} = \boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X}$ 为

$$\hat{\boldsymbol{R}}_{xx} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{8.7.55}$$

式中，$\boldsymbol{\Lambda} = \boldsymbol{\Sigma}^2$ 或 $\lambda_i = \sigma_i^2$。若主特征值 λ_i 的个数为 D，与之对应的特征向量为 $\boldsymbol{v}_i, i = 1, 2, \cdots, D$，则由主分量分析方法，可求得

$$x_m(n) = \sum_{k=1}^{D} a_{mk}\phi_k(n), \quad m = 1, 2, \cdots, N, n = 1, 2, \cdots, L \tag{8.7.56}$$

式中

$$a_{mk} = \sqrt{\lambda_k}v_{mk}, \qquad m = 1, 2, \cdots, N, k = 1, 2, \cdots, D \tag{8.7.57}$$

$$\phi_m(n) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_m}}\boldsymbol{v}_m^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(n), \qquad m = 1, 2, \cdots, N \tag{8.7.58}$$

这里，v_{mk} 是 $\boldsymbol{v}_k$ 的第 m 个元素。

利用式 (8.7.56) 求得的 $x_1(n), x_2(n), \cdots, x_N(n)$ 可以看作是原含有噪声的观测数据的降秩估计。将这些估计作为输入设计出来的 Wiener 滤波器 $\boldsymbol{w}_{\text{opt}} = \boldsymbol{R}_{xx}^{-1}\boldsymbol{r}_{xd}$ 即为降秩 Wiener 滤波器。

3. 互谱测度法

主分量分析技术将 Wiener 滤波器的秩降至观测数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 的信号子空间的有效秩 D，其局限性是不能再作进一步的数据压缩。为了克服这一降秩局限性，Goldstein 与 Reed[178] 于 1997 年提出了一种能够将 Winer 滤波器的秩降至有效秩 D 以下的方法。

若记滤波器输出向量 $\boldsymbol{y}=[y(1),y(2),\cdots,y(L)]^{\mathrm{T}}$ 和期望响应向量 $\boldsymbol{d}=[d(1),d(2),\cdots,d(L)]^{\mathrm{T}}$，则滤波器方程 $y(n)=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}(n)$ 可以写作

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}^{*} \tag{8.7.59}$$

考查降秩 Wiener 滤波器输出向量的范数

$$E_y=\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}^{*}={\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_{xx}\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}=\boldsymbol{r}_{xd}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_{xx}^{-1}\boldsymbol{r}_{xd}=\boldsymbol{r}_{\mathrm{xd}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{r}_{xd}$$

定义 $\boldsymbol{\rho}=[\rho_1,\rho_2,\cdots,\rho_N]^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{r}_{xd}$，则上式的 E_y 可以写成

$$E_y=\boldsymbol{\rho}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Lambda}^{-1}\boldsymbol{\rho}=\sum_{k=1}^{N}\frac{|\rho_k|^2}{\lambda_k}=\sum_{k=1}^{N}\theta_k \tag{8.7.60}$$

因为 $\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_i)$。

式 (8.7.60) 表明，滤波器的 L 个输出能量之和等于 N 个系数 $\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_N$ 之和，故称 θ_i 为互谱能量或测度。显然，若选择 M 个大的互谱能量 $\theta_1,\theta_2,\cdots,\cdots,\theta_M$，而舍弃其他小的互谱能量，将能够保证 E_y 在 N 维观测数据空间中的主要贡献。仿照主分量分析方法，找出与 M 个大的互谱能量对应的特征向量，用这 M 个特征向量作为信号展开的基向量。由 D 个与大特征值对应的特征向量张成的子空间称为信号子空间。与此类似，由 M 个与大互谱能量对应的特征向量张成的子空间称为互谱子空间 (cross-spectral subspace)。

Wiener 滤波器输出误差向量为 [178]

$$\boldsymbol{e}=\boldsymbol{d}-\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}^{*}=\boldsymbol{d}-\boldsymbol{y} \tag{8.7.61}$$

均方误差为

$$\boldsymbol{e}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}=\sigma_d^2-E_y=\sigma_d^2-\sum_{k=1}^{N}\theta_k \tag{8.7.62}$$

式中，$\sigma_d^2=\boldsymbol{d}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{d}$。

显然，对于降秩 Wiener 滤波器而言，由于舍弃的只是很小的互谱能量 θ_i，使得 E_y 的主要贡献得以保留，故滤波器的均方误差将只是稍有增加。从这个角度讲，降秩逼近法表现为一种“数据压缩”形式。

8.8 广义特征值分解

前面几节讨论了单个 $n\times n$ 矩阵的标准特征值分解及其应用。从这一节开始，我们的注意力将陆续转移到特征值问题的各种推广。本节先考虑两个矩阵的特征值分解，习惯称其为广义特征值分解。事实上，单个矩阵的标准特征值分解是广义特征值分解的一种特例。

8.8.1 广义特征值分解及其性质

令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个 $n \times n$ 正方矩阵，它们组成一矩阵束 (matrix pencil) 或矩阵对 (matrix pair)，记作 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$。现在考虑广义特征值问题：求所有的标量 λ 使得方程

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \lambda \boldsymbol{B}\boldsymbol{u} \tag{8.8.1}$$

具有非零解 $\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}$。这样的标量 λ 和非零向量 $\boldsymbol{u}$ 分别称为矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的广义特征值 (generalized eigenvalue) 和广义特征向量 (generalized eigenvector) [1]。一个广义特征值和与之对应的广义特征向量合称广义特征对，记作 $(\lambda, \boldsymbol{u})$。式 (8.8.1) 也称广义特征方程。观察知，特征值问题是当矩阵束取作 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{I})$ 时广义特征值问题的一个特例。

虽然广义特征值和广义特征向量总是成对出现，但是广义特征值可以单独求出。这一情况与特征值可以单独求出类似。为了单独求出广义特征值，将广义特征方程式 (8.8.1) 稍加改写，即可写作

$$(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{B})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \tag{8.8.2}$$

如果上式括号内的矩阵 $\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{B}$ 是非奇异的，则广义特征方程只有唯一的零解 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$。显然，这种解是平凡的，毫无意义的。为了求出非零的有用解，矩阵 $\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{B}$ 就不得具有逆矩阵。这意味着，它们的行列式必须等于零，即

$$(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{B}) \text{ 奇异} \iff \det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{B}) = 0 \tag{8.8.3}$$

鉴于此，矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 又常表示为 $\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{B}$。

对于 $n \times n$ 维的矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$，式 (8.8.3) 是一个 n 阶多项式，称为广义特征多项式。因此，矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的广义特征值 λ 是满足广义特征多项式

$$\det(\boldsymbol{A} - z\boldsymbol{B}) = 0 \tag{8.8.4}$$

的所有解 z (包括零值在内)。显然，若矩阵 $\boldsymbol{B}$ 为单位矩阵，则广义特征多项式退化为 $\det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}) = 0$ 即特征多项式 (8.1.5)。从这一角度讲，广义特征多项式是特征多项式的推广，而特征多项式是广义特征多项式在 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I}$ 时的一个特例。

若将矩阵束的广义特征值记作 $\lambda(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$，则广义特征值定义为

$$\lambda(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}) = \{z \in C : \det(\boldsymbol{A} - z\boldsymbol{B}) = 0\} \tag{8.8.5}$$

定理 8.8.1[516] $\lambda \in C$ 和 $\boldsymbol{u} \in C^n$ 分别是矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})_{n\times n}$ 的广义特征值和广义特征向量，当且仅当

(1) $\det(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{B}) = 0$。

(2) $\boldsymbol{u} \in \mathrm{Null}(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{B})$，并且 $\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}$。

无论是在自然科学还是技术科学中，有时需要讨论正则矩阵束的特征值问题。

1 在文献 [240, p.350]) 中，广义特征向量定义如下：假定 $(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$，$\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}$，并且存在向量 $\boldsymbol{v}$ 满足 $(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{v} = \boldsymbol{u}$，则称 $\boldsymbol{v}$ 是一个广义特征向量。在文献 [515, p.56] 中，则将对某个正整数 m，满足 $(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})^m \boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$ 的向量 $\boldsymbol{x}$ 定义为广义特征向量。

定义 8.8.1 若 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 Hermitian 矩阵，并且 $\boldsymbol{B}$ 正定，则称 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 为正则矩阵束。

正则矩阵束的特征值问题与 Hermitian 矩阵的特征值问题非常类似。

定理 8.8.2[360] 若 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$ 是正则矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})_{n\times n}$ 的广义特征值，则

(1) 存在矩阵 $\boldsymbol{X} \in C^{n\times n}$，使得

$$\boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_n, \quad \boldsymbol{X}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$$

或等价写作

$$\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{I}_n, \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\Lambda}$$

式中，$\boldsymbol{\Lambda} = \mathrm{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n)$。

(2) 所有广义特征值都是实的，即 $\lambda_i \in R,\ i = 1, 2, \cdots, n$。

(3) 若记 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n]$，则有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i = \lambda_i \boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

$$\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, \cdots, n$$

式中，δ_{ij} 为 Kronecker δ 函数。

下面是关于广义特征值问题 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$ 的一些性质 [238, pp.176~177]：

(1) 若矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 互换，则广义特征值将变为其倒数，但广义特征向量保持不变，即有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} \ \Rightarrow \ \boldsymbol{B}\boldsymbol{x} = \frac{1}{\lambda}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$$

(2) 若 $\boldsymbol{B}$ 非奇异，则广义特征值分解简化为标准的特征值分解

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} \ \Rightarrow \ (\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A})\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$$

(3) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为正定的 Hermitian 矩阵，则广义特征值必定是实的，并且与不同广义特征值对应的广义特征向量相对于正定矩阵 $\boldsymbol{B}$ 正交，即

$$\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j = \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j = 0$$

(4) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为实对称矩阵，并且 $\boldsymbol{B}$ 正定，则广义特征值问题 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$ 可以变换为标准的对称特征值问题

$$(\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{L}^{-\mathrm{T}})(\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}) = \lambda(\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})$$

式中，$\boldsymbol{L}$ 为下三角矩阵，它是 Cholesky 分解 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$ 的因子。

(5) 若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为实对称的正定矩阵，则广义特征值一定是正的。

(6) 如果 $\boldsymbol{A}$ 奇异，则 $\lambda = 0$ 必定是一个广义特征值。

(7) 若 $\tilde{\boldsymbol{B}} = \boldsymbol{B} + (1/\alpha)\boldsymbol{A}$，其中，$\alpha$ 是任意一个不等于零的标量，则修正的广义特征值问题

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \tilde{\lambda}\tilde{\boldsymbol{B}}\boldsymbol{x}$$

的广义特征值 $\tilde{\lambda}$ 与原广义特征值 λ 之间存在下列关系：

$$\frac{1}{\tilde{\lambda}} = \frac{1}{\lambda} + \frac{1}{\alpha}$$

这里给出性质 (3) 的证明：用 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}$ 左乘 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$，得

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} \neq 0$$

取复数共轭，并利用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的 Hermitian 性，立即有

$$\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda^*\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} \neq 0$$

由以上两式，立即知

$$\lambda\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} = \lambda^*\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} \Rightarrow \lambda = \lambda^*$$

因为 $\lambda\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x} > 0$。对于广义特征值 $\lambda_i \neq \lambda_j$，有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_i = \lambda_i\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_i, \qquad \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j = \lambda_j\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j \tag{1}$$

用 $\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{x}_j^{\mathrm{H}}$ 分别左乘上式，则

$$\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j = \lambda_i\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j, \qquad \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j = \lambda_j\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j$$

于是

$$(\lambda_i - \lambda_j)\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j = 0 \ \Rightarrow \ \boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j = 0$$

将 $\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}_j = 0$ 代入式 (1)，并注意到 $\lambda_i \neq \lambda_j$，易知 $\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j = 0$。

此外，文献 [238, p.177] 还将“若 $\boldsymbol{B}$ 奇异，则 $\lambda \to \infty$ 一定是一个广义特征值”列为性质之一。需要指出的是，这一性质并不成立，请看下面的反例：

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{A} &= \begin{bmatrix}1 & 2\\0 & 3\end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{bmatrix} \qquad \longrightarrow \qquad \lambda(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}) = \{1\}\\
\boldsymbol{A} &= \begin{bmatrix}1 & 2\\0 & 0\end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix}0 & 0\\1 & 0\end{bmatrix} \qquad \longrightarrow \qquad \lambda(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}) = \{0\}\\
\boldsymbol{A} &= \begin{bmatrix}1 & 2\\0 & 0\end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix}1 & 0\\0 & 0\end{bmatrix} \qquad \longrightarrow \qquad \lambda(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})\ \text{任意}
\end{aligned}$$

这表明，与矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 存在 n 个特征值 (多重特征值计算多重数在内) 不同，当 $\boldsymbol{B}_{n\times n}$ 奇异时，矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值有可能只有一个，并且不一定取无穷大。

严格说来，上面介绍的广义特征向量 $\boldsymbol{u}$ 称为矩阵束的右广义特征向量。与广义特征值 λ 对应的左特征向量定义为满足

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A} = \lambda\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B} \tag{8.8.6}$$

的列向量 $\boldsymbol{v}$。令 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Y}$ 均为非奇异矩阵，则由式 (8.8.1) 和式 (8.8.6) 立即知

$$\boldsymbol{XAu} = \lambda \boldsymbol{XBu} \tag{8.8.7}$$

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AY} = \lambda \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{BY} \tag{8.8.8}$$

这表明，矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 左乘非奇异矩阵，不改变矩阵束的右广义特征向量；而矩阵束右乘非奇异矩阵，则不改变左广义特征向量。

在很多应用中，往往只使用广义特征值 (如稍后将介绍的 ESPRIT 方法)。在这种情况下，等价矩阵束是一个非常有用的概念。

定义 8.8.2 所有广义特征值相同的两个矩阵束称为等价矩阵束。

由广义特征值的定义 $\det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})=0$ 和行列式的性质，易知

$$\det(\boldsymbol{XAY}-\lambda\boldsymbol{XBY})=0 \quad \Longleftrightarrow \quad \det(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})=0$$

因此，矩阵束左乘任意一个非奇异矩阵与 (或) 右乘任意一个非奇异矩阵，都不会改变矩阵束的广义特征值。这一结果可以总结为下面的命题。

命题 8.8.1 若 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{Y}$ 是两个非奇异矩阵，则 $(\boldsymbol{XAY},\boldsymbol{XBY})$ 和 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 是两个等价的矩阵束。

8.8.2 广义特征值分解算法

一个简单事实是：若 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 Hermitian 矩阵，并且 $\boldsymbol{B}$ 正定 (即非奇异) 时，广义特征值分解公式 (8.8.1) 可等价改写为

$$\boldsymbol{AB}^{-1}\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u} \tag{8.8.9}$$

即广义特征值分解变为 Hermitain 矩阵的标准特征值分解。

下面的算法使用压缩映射计算 $n\times n$ 实对称矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征对 $(\lambda,\boldsymbol{u})$。

算法 8.8.1 (广义特征值分解的 Lanczos 算法)[397,p.298]

步骤 1 初始化

选择范数满足 $\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_1=1$ 的向量 $\boldsymbol{u}_1$，并令 $\alpha_1=0$, $\boldsymbol{z}_0=\boldsymbol{u}_0=\boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{z}_1=\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_1$。

步骤 2 对 $i=1,2,\cdots,n$，计算

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{u}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i-\alpha_i\boldsymbol{z}_{i-1}\\
&\beta_i=\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{u}_i\rangle\\
&\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}-\beta_i\boldsymbol{z}_i\\
&\boldsymbol{w}=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{u}\\
&\alpha_{i+1}=\sqrt{\langle\boldsymbol{w},\boldsymbol{u}\rangle}\\
&\boldsymbol{u}_{i+1}=\boldsymbol{w}/\alpha_{i+1}\\
&\boldsymbol{z}_{i+1}=\boldsymbol{u}/\alpha_{i+1}\\
&\lambda_i=\beta_{i+1}/\alpha_{i+1}
\end{aligned}$$

广义特征值问题也可等价写作

$$\alpha \boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \beta \boldsymbol{B}\boldsymbol{u} \tag{8.8.10}$$

此时，广义特征值定义为 $\lambda = \beta/\alpha$。

下面是计算 $n\times n$ 对称正定矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值分解的正切算法，它是 Drmac 于 1998 年提出的 [135]。

算法 8.8.2 (对称正定矩阵束的广义特征值分解)

步骤 1　计算 $\boldsymbol{\Delta}_A = \mathrm{diag}(A_{11}, A_{22}, \cdots, A_{nn})^{-1/2}, \boldsymbol{A}_s = \boldsymbol{\Delta}_A\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Delta}_A$ 和 $\boldsymbol{B}_1 = \boldsymbol{\Delta}_A\boldsymbol{B}\boldsymbol{\Delta}_A$。

步骤 2　计算 Cholesky 分解 $\boldsymbol{R}_A^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_A = \boldsymbol{A}_s$ 和 $\boldsymbol{R}_B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{R}_B = \boldsymbol{\Pi}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{B}_1\boldsymbol{\Pi}$ (列旋转矩阵 $\boldsymbol{\Pi}$ 为置换矩阵，参见 4.6 节)。

步骤 3　通过求解矩阵方程 $\boldsymbol{F}\boldsymbol{R}_B = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\Pi}$，计算 $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\Pi}\boldsymbol{R}_B^{-1}$。

步骤 4　求 $\boldsymbol{F}$ 的奇异值分解 $\boldsymbol{\Sigma} = \boldsymbol{V}\boldsymbol{F}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$。

步骤 5　计算 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{\Delta}_A\boldsymbol{\Pi}\boldsymbol{R}_B^{-1}\boldsymbol{U}$。

输出　矩阵 $\boldsymbol{X}$ 和 $\boldsymbol{\Sigma}$ 满足 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{X}\boldsymbol{\Sigma}^2$。

当矩阵 $\boldsymbol{B}$ 奇异时，以上两种算法将是不稳定的。矩阵 $\boldsymbol{B}$ 奇异时的矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值分解算法由 Nour-Omid 等人 [338] 提出。这种算法的主要思想是：通过引入一移位因子 σ，使 $(\boldsymbol{A}-\sigma\boldsymbol{B})$ 非奇异。

算法 8.8.3 ($\boldsymbol{B}$ 奇异时的广义特征值分解算法)[338],[397, p.299]

步骤 1　初始化

选择 $\mathrm{Range}[(\boldsymbol{A}-\sigma\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}]$ 的基向量 $\boldsymbol{w}$，计算 $\boldsymbol{z}_1 = \boldsymbol{B}\boldsymbol{w}$，$\alpha_1 = \sqrt{\langle \boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}_1\rangle}$，令 $\boldsymbol{u}_0 = \boldsymbol{0}$。

步骤 2　对 $i = 1, 2, \cdots, n$，计算

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{u}_i = \boldsymbol{w}/\alpha_i \\
&\boldsymbol{z}_i = (\boldsymbol{A}-\sigma\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{w} \\
&\boldsymbol{w} = \boldsymbol{w} - \alpha_i\boldsymbol{u}_{i-1} \\
&\beta_i = \langle \boldsymbol{w}, \boldsymbol{z}_i\rangle \\
&\boldsymbol{z}_{i+1} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{w} \\
&\alpha_{i+1} = \sqrt{\langle \boldsymbol{z}_{i+1}, \boldsymbol{w}\rangle} \\
&\lambda_i = \beta_i/\alpha_{i+1}
\end{aligned}$$

8.8.3 广义特征值分解的总体最小二乘方法

在广义特征值分解的应用中，我们往往只对非零的广义特征值感兴趣，因为这些非零的广义特征值的个数反映了信号分量的个数，而广义特征值本身则往往隐含了信号参数的有用信息。然而，在实际应用中，信号分量的个数常常是不知道的，需要估计。通常，矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的维数往往取比信号分量实际个数大的整数。另一方面，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 又常常分别由观测数据向量的自相关矩阵和互相关矩阵构成。在实际应用中，这些相关矩阵中的自相关函数和互相关函数往往由比较短的观测样本数据估计得到，存在比较大的

估计误差。矩阵束的实际维数取大和相关矩阵存在较大估计误差这两个事实，使得矩阵束的非零广义特征值的估计成为最小二乘算子。

Roy 和 Kailath 指出 [394]，最小二乘算子会导致在求解广义特征值问题的某些潜在的数值困难。前面两章已详细分析了奇异值分解 (SVD) 和总体最小二乘 (TLS) 的应用可以将一个较大维数 $(m \times m)$ 病态最小二乘问题转化为一个较小维数 $(p \times p)$ 的无病态总体最小二乘问题。因此，求解广义特征值问题的总体最小二乘方法成为广义特征值分解应用中的一种自然选择。

已提出了多种求解广义特征值问题的总体最小二乘方法。这些方法的中心思想都是在不改变矩阵束的非零广义特征值的前提下，利用截尾的奇异值分解，将一个大维数的矩阵束转化为一个小维数的矩阵束。这些方法需要的奇异值分解次数各不相同。其中，Zhang 和 Liang [508] 提出的方法只需要 1 次奇异值分解，是计算最简单的。

考虑矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值分解。令 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解为

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^H = [\boldsymbol{U}_1,\ \boldsymbol{U}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{V}_2^{\mathrm{H}}\end{bmatrix} \tag{8.8.11}$$

式中，$\boldsymbol{\Sigma}_1$ 由 p 个主奇异值组成。在不改变广义特征值的条件下，可以用 $\boldsymbol{U}_1^H$ 左乘和用 $\boldsymbol{V}_1$ 右乘矩阵 $\boldsymbol{A}-\gamma\boldsymbol{B}$，得到

$$\boldsymbol{\Sigma}_1 - \gamma\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}_1 \tag{8.8.12}$$

现在，原较大维数的矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值问题便变成了较小维数 $(p\times p)$ 的矩阵束 $(\boldsymbol{\Sigma}_1,\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{V}_1)$ 的广义特征值问题。这一方法称为广义特征值分解的总体最小二乘方法。

8.8.4 应用举例——ESPRIT 方法

ESPRIT 是借助旋转不变技术估计信号参数 (estimating signal parameter via rotational invariance techniques) 的英文缩写。ESPRIT 方法最早是由 Roy 等人 [394] 于 1989 年提出的，现已成为现代信号处理中一种主要方法，并得到了广泛的应用。

考虑白噪声中的 p 个谐波信号

$$x(n) = \sum_{i=1}^{p} s_i \mathrm{e}^{\mathrm{j}n\omega_i} + w(n) \tag{8.8.13}$$

式中，s_i 和 $\omega_i \in (-\pi,\pi)$ 分别为第 i 个谐波信号的复幅值和频率。假定 $w(n)$ 是一零均值、方差为 σ^2 的复值高斯白噪声过程，即

$$\mathrm{E}\{w(k)w^*(l)\} = \sigma^2\delta(k-l)$$

$$\mathrm{E}\{w(k)w(l)\} = 0,\quad \forall\ k,l$$

现在的问题是：只根据观测数据 $x(1),x(2),\cdots,x(N)$，估计谐波信号的个数 p 和频率 $\omega_1,\omega_2,\cdots,\omega_p$。

定义一个新的过程 $y(n) \stackrel{\text{def}}{=} x(n+1)$。选择 $m > p$，并引入以下 $m \times 1$ 维向量：

$$\boldsymbol{x}(n) \stackrel{\text{def}}{=} [x(n), x(n+1), \cdots, x(n+m-1)]^{\mathrm{T}} \tag{8.8.14}$$

$$\boldsymbol{w}(n) \stackrel{\text{def}}{=} [w(n), w(n+1), \cdots, w(n+m-1)]^{\mathrm{T}} \tag{8.8.15}$$

$$\begin{aligned}\boldsymbol{y}(n) &\stackrel{\text{def}}{=} [y(n), y(n+1), \cdots, y(n+m-1)]^{\mathrm{T}} \\ &= [x(n+1), x(n+2), \cdots, x(n+m)]^{\mathrm{T}}\end{aligned} \tag{8.8.16}$$

$$\boldsymbol{a}(\omega_i) \stackrel{\text{def}}{=} [1, \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_i}, \cdots, \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,(m-1)\omega_i}]^{\mathrm{T}} \tag{8.8.17}$$

于是，式 (8.8.13) 可以写作向量形式：

$$\boldsymbol{x}(n) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{s}(n) + \boldsymbol{w}(n) \tag{8.8.18}$$

另有

$$\boldsymbol{y}(n) = \boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{s}(n) + \boldsymbol{w}(n+1) \tag{8.8.19}$$

式中

$$\boldsymbol{A} \stackrel{\text{def}}{=} [\boldsymbol{a}(\omega_1), \boldsymbol{a}(\omega_2), \cdots, \boldsymbol{a}(\omega_p)] \tag{8.8.20}$$

$$\boldsymbol{s}(n) \stackrel{\text{def}}{=} [s_1 \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_1 n}, s_2 \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_2 n}, \cdots, s_p \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_p n}]^{\mathrm{T}} \tag{8.8.21}$$

$$\boldsymbol{\Phi} \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{diag}(\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_1}, \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_2}, \cdots, \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_p}) \tag{8.8.22}$$

注意，$\boldsymbol{\Phi}$ 是一酉矩阵，即有 $\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Phi} = \boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}$，它将空间的向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 和 $\boldsymbol{y}(n)$ 联系在一起；矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m \times p$ 维 Vandermonde 矩阵。由于 $\boldsymbol{y}(n) = \boldsymbol{x}(n+1)$，故 $\boldsymbol{y}(n)$ 可以看作是 $\boldsymbol{x}(n)$ 的平移结果。鉴于此，矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 被称作旋转算符，因为平移是最简单的旋转。

观测向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 的自相关矩阵为

$$\boldsymbol{R}_{xx} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} + \sigma^2\boldsymbol{I} \tag{8.8.23}$$

式中

$$\boldsymbol{P} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{s}(n)\boldsymbol{s}^{\mathrm{H}}(n)\} \tag{8.8.24}$$

是信号向量的相关矩阵。若各信号不相关，则 $\boldsymbol{P} = \mathrm{diag}(\mathrm{E}\{|s_1|^2\}, \cdots, \mathrm{E}\{|s_p|^2\})$ 是一个 $p \times p$ 对角矩阵，其对角线上的元素为各信号的功率。在 ESPRIT 方法里，只要求矩阵 $\boldsymbol{P}$ 非奇异，并不要求它一定是对角矩阵。

向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 和 $\boldsymbol{y}(n)$ 的互相关矩阵为

$$\boldsymbol{R}_{xy} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(n)\} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} + \sigma^2\boldsymbol{Z} \tag{8.8.25}$$

式中，$\sigma^2\boldsymbol{Z} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{w}(n)\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n+1)\}$。容易验证，$\boldsymbol{Z}$ 是一个 $m \times m$ 特殊矩阵：

$$\boldsymbol{Z} = \begin{bmatrix} 0 & & & 0 \\ 1 & 0 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ 0 & & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{8.8.26}$$

即主对角线下面的对角线上的元素全部为 1，而其他元素皆等于 0。

由自相关矩阵的元素 $[\boldsymbol{R}_{xx}]_{ij} = \mathrm{E}\{x(i)x^*(j)\} = R_{xx}(i-j) = R_{xx}^*(j-i)$ 知

$$\boldsymbol{R}_{xx} = \begin{bmatrix} R_{xx}(0) & R_{xx}^*(1) & \cdots & R_{xx}^*(m-1) \\ R_{xx}(1) & R_{xx}(0) & \cdots & R_{xx}^*(m-2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R_{xx}(m-1) & R_{xx}(m-2) & \cdots & R_{xx}(0) \end{bmatrix} \tag{8.8.27}$$

类似地，互相关矩阵的元素为 $[\boldsymbol{R}_{xy}]_{ij} = \mathrm{E}\{x(i)y^*(j)\} = \mathrm{E}\{x(i)x^*(j+1)\} = R_{xx}(i-j-1) = R_{xx}^*(j-i+1)$，即有

$$\boldsymbol{R}_{xy} = \begin{bmatrix} R_{xx}^*(1) & R_{xx}^*(2) & \cdots & R_{xx}^*(m) \\ R_{xx}(0) & R_{xx}^*(1) & \cdots & R_{xx}^*(m-1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R_{xx}(m-2) & R_{xx}(m-3) & \cdots & R_{xx}^*(1) \end{bmatrix} \tag{8.8.28}$$

注意，$R_{xx}(0) = R_{xx}^*(0)$。

现在的问题是：已知自相关函数 $R_{xx}(0), R_{xx}(1), \cdots, R_{xx}(m)$，如何估计谐波信号的个数 p、谐波频率 ω_i 以及谐波功率 $|s_i|^2\,(i=1,2,\cdots,p)$？

向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 经过平移，变为 $\boldsymbol{y}(n) = \boldsymbol{x}(n+1)$，但是这种平移却保持了 $\boldsymbol{x}(n)$ 和 $\boldsymbol{y}(n)$ 对应的信号子空间的不变性。这是因为 $\boldsymbol{R}_{xx} \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(n)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n)\} = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(n+1)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(n+1)\} \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{R}_{yy}$，它们完全相同!

对 $\boldsymbol{R}_{xx}$ 作特征值分解，可以得到其最小特征值 $\lambda_{\min} = \sigma^2$。构造一对新的矩阵

$$\boldsymbol{C}_{xx} = \boldsymbol{R}_{xx} - \lambda_{\min}\boldsymbol{I} = \boldsymbol{R}_{xx} - \sigma^2\boldsymbol{I} = \boldsymbol{APA}^{\mathrm{H}} \tag{8.8.29}$$

$$\boldsymbol{C}_{xy} = \boldsymbol{R}_{xy} - \lambda_{\min}\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{R}_{xy} - \sigma^2\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{AP\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}} \tag{8.8.30}$$

$(\boldsymbol{C}_{xx}, \boldsymbol{C}_{xy})$ 组成矩阵束。

考查矩阵束

$$\boldsymbol{C}_{xx} - \gamma\boldsymbol{C}_{xy} = \boldsymbol{AP}(\boldsymbol{I} - \gamma\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \tag{8.8.31}$$

由于 $\boldsymbol{A}$ 满列秩和 $\boldsymbol{P}$ 非奇异，所以从矩阵秩的角度，式 (8.8.31) 可以写作

$$\mathrm{rank}(\boldsymbol{C}_{xx} - \gamma\boldsymbol{C}_{xy}) = \mathrm{rank}(\boldsymbol{I} - \gamma\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}) \tag{8.8.32}$$

当 $\gamma \neq \omega_i, i=1,2,\cdots,p$ 时，矩阵 $(\boldsymbol{I} - \gamma\boldsymbol{\Phi})$ 是非奇异的，而当 $\gamma = \mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega_i}$ 时，由于 $\gamma\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\omega_i} = 1$，所以矩阵 $(\boldsymbol{I} - \gamma\boldsymbol{\Phi})$ 奇异，即秩亏缺。这说明，$\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega_i}, i=1,2,\cdots,p$ 都是矩阵束 $(\boldsymbol{C}_{xx}, \boldsymbol{C}_{xy})$ 的广义特征值。这一结果可以用下面的定理加以归纳。

定理 8.8.3 定义 $\boldsymbol{\Gamma}$ 为矩阵束 $(\boldsymbol{C}_{xx}, \boldsymbol{C}_{xy})$ 的广义特征值矩阵，其中，$\boldsymbol{C}_{xx} = \boldsymbol{R}_{xx} - \lambda_{\min}\boldsymbol{I}$，$\boldsymbol{C}_{xy} = \boldsymbol{R}_{xy} - \lambda_{\min}\boldsymbol{Z}$，且 $\lambda_{\min}$ 是自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_{xx}$ 的最小特征值。若矩阵 $\boldsymbol{P}$ 非奇异，则矩阵 $\boldsymbol{\Gamma}$ 与旋转算符矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 之间有下列关系：

$$\boldsymbol{\Gamma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \tag{8.8.33}$$

即 $\boldsymbol{\Gamma}$ 的非零元素是旋转算符矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 的各元素的一个排列。

基本的 ESPRIT 算法可总结如下。

算法 8.8.4 (基本 ESPRIT 算法 1)

步骤 1 利用已知观测数据 $x(1),x(2),\cdots,x(N)$ 估计自相关函数 $R_{xx}(0),R_{xx}(1),\cdots,R_{xx}(m)$。

步骤 2 由估计的自相关函数构造 $m\times m$ 自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_{xx}$ 和 $m\times m$ 互相关矩阵 $\boldsymbol{R}_{xy}$。

步骤 3 求 $\boldsymbol{R}_{xx}$ 的特征值分解。对于 $m>p$，最小特征值为噪声方差 σ^2 的估计。

步骤 4 利用 σ^2 计算 $\boldsymbol{C}_{xx}=\boldsymbol{R}_{xx}-\sigma^2\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{C}_{xy}=\boldsymbol{R}_{xy}-\sigma^2\boldsymbol{Z}$。

步骤 5 求矩阵束 $(\boldsymbol{C}_{xx},\boldsymbol{C}_{xy})$ 的广义特征值分解，得到位于单位圆上的 p 个广义特征值 $\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega_i},i=1,2,\cdots,p$，它们直接给出谐波频率。

特别地，当各谐波信号 $s_1(n),\cdots,s_p(n)$ 相互独立时，我们还可以计算出各谐波的功率 $\mathrm{E}\{|s_i|^2\}$，$i=1,2,\cdots,p$。在信号相互独立的条件下，矩阵

$$\boldsymbol{P}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{s}(n)\boldsymbol{s}^{\mathrm{H}}(n)\}=\mathrm{diag}(\mathrm{E}\{|s_1|^2\},\cdots,\mathrm{E}\{|s_p|^2\})$$

为对角矩阵。令 $\boldsymbol{e}_i$ 是对应于广义特征值 γ_i 的广义特征向量。由定义知，$\boldsymbol{e}_i$ 满足关系式

$$\boldsymbol{APA}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_i=\gamma_i\boldsymbol{AP\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_i \tag{8.8.34}$$

或等价于

$$\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AP}(\boldsymbol{I}-\gamma_i\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_i=0 \tag{8.8.35}$$

显而易见，对角矩阵 $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{I}-\gamma_i\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}})$ 的第 i 个对角元素等于零，而其他对角元素不等于零 (用 $\times$ 表示，它是我们不感兴趣的)，即

$$\boldsymbol{P}(\boldsymbol{I}-\gamma_i\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}})=\mathrm{diag}(\times,\cdots,\times,0,\times,\cdots,\times) \tag{8.8.36}$$

故知，为保证式 (8.8.35) 成立，$\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_i$ 必然具有以下形式：

$$\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}=[0,\cdots,0,e_i^*\boldsymbol{a}(\omega_i),0,\cdots,0] \tag{8.8.37}$$

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_i=[0,\cdots,0,\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(\omega_i)e_i,0,\cdots,0]^{\mathrm{T}} \tag{8.8.38}$$

也就是说，与广义特征值 γ_i 对应的广义特征向量 $\boldsymbol{e}_i$ 与除方向向量 $\boldsymbol{a}(\omega_i)$ 以外的其他所有方向向量 $\boldsymbol{a}(\omega_j)$，$j\neq i$ 正交。另一方面，对角矩阵 $\gamma_i\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}$ 的 (i,i) 元素等于 1，即

$$\gamma_i\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}=\mathrm{diag}(\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\omega_1},\cdots,\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\omega_{i-1}},1,\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\omega_{i+1}},\cdots,\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\omega_p}) \tag{8.8.39}$$

将 $\boldsymbol{C}_{xx}=\boldsymbol{APA}^{\mathrm{H}}$ 代入式 (8.8.35)，得

$$\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AP}\gamma_i\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_i=\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_{xx}\boldsymbol{e}_i \tag{8.8.40}$$

将式 (8.8.37)、式 (8.8.38) 和式 (8.8.39) 代入式 (8.8.40)，并注意到 $\boldsymbol{P}$ 是对角矩阵，则有

$$\mathrm{E}\{|s_i(n)|^2\}|\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}(\omega_i)|^2 = \boldsymbol{e}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_{xx}\boldsymbol{e}_i \tag{8.8.41}$$

即

$$\mathrm{E}\{|s_i(n)|^2\} = \frac{\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_{xx}\boldsymbol{e}_i}{|\boldsymbol{e}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}(\omega_i)|^2} \tag{8.8.42}$$

这就是当各信号相互独立时，各信号功率的估计公式。

以上介绍的基本 ESPRIT 方法可以看作是一种最小二乘算子，其作用是将原 m 维观测空间约束到一个子空间 (其维数等于波达方向个数 p)。因此，这种基本 ESPRIT 方法有时称作 LS-ESPRIT 算法。前已分析过，将总体最小二乘方法的思想应用于广义特征值分解，可以改善其数值性能。因此，对 ESPRIT 方法有必要使用下面的总体最小二乘算法。

算法 8.8.5 (TLS-ESPRIT 算法)[508]

步骤 1　进行矩阵 $\boldsymbol{R}_{xx}$ 的特征值分解。

步骤 2　利用最小特征值 σ^2 计算 $\boldsymbol{C}_{xx} = \boldsymbol{R}_{xx} - \sigma^2\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{C}_{xy} = \boldsymbol{R}_{xy} - \sigma^2\boldsymbol{Z}$。

步骤 3　作矩阵 $\boldsymbol{C}_{xx}$ 的奇异值分解，确定其有效秩，并存储与 p 个主奇异值对应的 $\boldsymbol{\Sigma}_1, \boldsymbol{U}_1$ 和 $\boldsymbol{V}_1$。

步骤 4　计算 $\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_{xy}\boldsymbol{V}_1$。

步骤 5　求矩阵束 $(\boldsymbol{\Sigma}_1,\ \boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_{xy}\boldsymbol{V}_1)$ 的广义特征值分解，得到单位圆上的广义特征值，它们直接给出谐波频率。

业已证明，虽然 LS-ESPRIT 和 TLS-ESPRIT 给出相同的渐近 (对大样本) 估计精度，但是在小样本时 TLS-ESPRIT 总是比 LS-ESPRIT 好。此外，与 LS-ESPRIT 不同，TLS-ESPRIT 考虑了 $\boldsymbol{C}_{xx}$ 和 $\boldsymbol{C}_{xy}$ 二者的噪声影响，所以比 LS-ESPRIT 更合理。

8.8.5 相似变换在广义特征值分解中的应用

考查一个由 m 个阵元组成的等距线阵。如图 8.8.1 所示，现在将这个等距线阵分为两个子阵列，其中，子阵列 1 由第 1 个至第 $m-1$ 个阵元组成，子阵列 2 由第 2 个至第 m 个阵元组成。

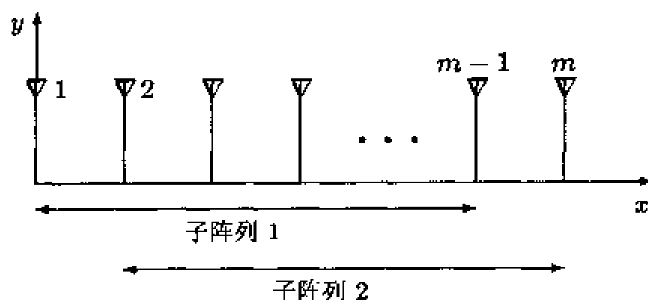


图 8.8.1　阵列分成两个子阵列

令 $m \times N$ 矩阵

$$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}(1), \boldsymbol{x}(2), \cdots, \boldsymbol{x}(N)] \tag{8.8.43}$$

代表原阵列的观测数据矩阵，其中，$\boldsymbol{x}(n) = [x_1(n), x_2(n), \cdots, x_m(n)]^{\mathrm{T}}$ 是 m 个阵元在 n 时刻的观测信号组成的观测数据向量；而 N 为数据长度，即 $n = 1, 2, \cdots, N$。

若令

$$\boldsymbol{S} = [\boldsymbol{s}(1), \boldsymbol{s}(2), \cdots, \boldsymbol{s}(N)] \tag{8.8.44}$$

代表信号矩阵，式中，$\boldsymbol{s}(n) = [s_1(n), s_2(n), \cdots, s_p(n)]^{\mathrm{T}}$ 表示信号向量，则对于 N 个快拍的数据，式 (8.8.13) 可以用矩阵形式表示成

$$\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}(1), \boldsymbol{x}(2), \cdots, \boldsymbol{x}(N)] = \boldsymbol{A}\boldsymbol{S} \tag{8.8.45}$$

式中，$\boldsymbol{A}$ 是 $m \times p$ 阵列方向矩阵。

令 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 是两个 $(m-1) \times m$ 选择矩阵，且有

$$\boldsymbol{J}_1 = [\boldsymbol{I}_{m-1} \,\vdots\, \boldsymbol{0}_{m-1}] \tag{8.8.46}$$

$$\boldsymbol{J}_2 = [\boldsymbol{0}_{m-1} \,\vdots\, \boldsymbol{I}_{m-1}] \tag{8.8.47}$$

式中，$\boldsymbol{I}_{m-1}$ 代表 $(m-1) \times (m-1)$ 单位矩阵，$\boldsymbol{0}_{m-1}$ 表示 $(m-1) \times 1$ 零向量。

用选择矩阵 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 分别左乘观测数据矩阵 $\boldsymbol{X}$，得到

$$\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{J}_1\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1(1), \boldsymbol{x}_1(2), \cdots, \boldsymbol{x}_1(N)] \tag{8.8.48}$$

$$\boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{J}_2\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_2(1), \boldsymbol{x}_2(2), \cdots, \boldsymbol{x}_2(N)] \tag{8.8.49}$$

式中

$$\boldsymbol{x}_1(n) = [x_1(n), x_2(n), \cdots, x_{m-1}(n)]^{\mathrm{T}}, \quad n = 1, 2, \cdots, N \tag{8.8.50}$$

$$\boldsymbol{x}_2(n) = [x_2(n), x_3(n), \cdots, x_m(n)]^{\mathrm{T}}, \quad n = 1, 2, \cdots, N \tag{8.8.51}$$

即是说，观测数据子矩阵 $\boldsymbol{X}_1$ 由观测数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的前 $m-1$ 行组成，相当于子阵列 1 的观测数据矩阵；$\boldsymbol{X}_2$ 则由 $\boldsymbol{X}$ 的后 $m-1$ 行组成，相当于子阵列 2 的观测数据矩阵。

令

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1 \\ \text{最后一行} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{第 1 行} \\ \boldsymbol{A}_2 \end{bmatrix} \tag{8.8.52}$$

则根据等距线阵的阵列响应矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的结构知，子矩阵 $\boldsymbol{A}_1$ 和 $\boldsymbol{A}_2$ 之间存在以下关系：

$$\boldsymbol{A}_2 = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{\Phi} \tag{8.8.53}$$

容易验证

$$\boldsymbol{X}_1 = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{S} \tag{8.8.54}$$

$$\boldsymbol{X}_2 = \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{S} = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{S} \tag{8.8.55}$$

由于 $\boldsymbol{\Phi}$ 是一酉矩阵，所以 $\boldsymbol{X}_1$ 和 $\boldsymbol{X}_2$ 具有相同的信号子空间和噪声子空间，即子阵列 1 和子阵列 2 具有相同的观测空间 (信号子空间 + 噪声子空间)。这就是等距线阵的平移不变性的物理解释。

由式 (8.8.23) 得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{R}_{xx} &= \boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} + \sigma^2\boldsymbol{I}\\ &= [\boldsymbol{U}_s, \boldsymbol{U}_n]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_s & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \sigma^2\boldsymbol{I}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_s^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{U}_n^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\\ &= [\boldsymbol{U}_s\boldsymbol{\Sigma}_s, \sigma^2\boldsymbol{U}_n]\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_s^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{U}_n^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\\ &= \boldsymbol{U}_s\boldsymbol{\Sigma}_s\boldsymbol{U}_s^{\mathrm{H}} + \sigma^2\boldsymbol{U}_n\boldsymbol{U}_n^{\mathrm{H}}\end{aligned} \tag{8.8.56}$$

由于 $\boldsymbol{I} - \boldsymbol{U}_n\boldsymbol{U}_n^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}_s\boldsymbol{U}_s^{\mathrm{H}}$，故由式 (8.8.56) 易知

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} + \sigma^2\boldsymbol{U}_s\boldsymbol{U}_s^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}_s\boldsymbol{\Sigma}_s\boldsymbol{U}_s^{\mathrm{H}} \tag{8.8.57}$$

用 $\boldsymbol{U}_s$ 右乘上式两边，注意到 $\boldsymbol{U}_s^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_s = \boldsymbol{I}$，并加以重排，即得

$$\boldsymbol{U}_s = \boldsymbol{A}\boldsymbol{T} \tag{8.8.58}$$

式中，$\boldsymbol{T}$ 是一个非奇异矩阵，且

$$\boldsymbol{T} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_s(\boldsymbol{\Sigma}_s - \sigma^2\boldsymbol{I})^{-1} \tag{8.8.59}$$

虽然 $\boldsymbol{T}$ 是一未知矩阵，但它只是下面分析中的一个“虚拟参数”，我们只用到它的非奇异性。用 $\boldsymbol{T}$ 右乘式 (8.8.52)，则有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{T} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{A}_1\boldsymbol{T}\\ \text{最后一行}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{第 1 行}\\ \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{T}\end{bmatrix} \tag{8.8.60}$$

采用相同的分块形式，将 $\boldsymbol{U}_s$ 也分块成

$$\boldsymbol{U}_s = \begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_1\\ \text{最后一行}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\text{第 1 行}\\ \boldsymbol{U}_2\end{bmatrix} \tag{8.8.61}$$

由于 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{U}_s$，故比较式 (8.8.60) 与式 (8.8.61)，立即有

$$\boldsymbol{U}_1 = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{T} \tag{8.8.62}$$

$$\boldsymbol{U}_2 = \boldsymbol{A}_2\boldsymbol{T} \tag{8.8.63}$$

将式 (8.8.53) 代入式 (8.8.63)，即有

$$\boldsymbol{U}_2 = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{T} \tag{8.8.64}$$

由式 (8.8.62) 及式 (8.8.64)，又有

$$\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{A}_1\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{U}_2 \tag{8.8.65}$$

定义

$$\boldsymbol{\Psi} = \boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{T} \tag{8.8.66}$$

矩阵 $\boldsymbol{\Psi}$ 称为矩阵 $\boldsymbol{\Phi}$ 的相似变换，因此它们具有相同的特征值，即 $\boldsymbol{\Psi}$ 的特征值也为 $\mathrm{e}^{\mathrm{j}\phi_m}$，$m=1,2,\cdots,M$。

将式 (8.8.66) 代入式 (8.8.65)，则得到一个重要的关系式，即

$$\boldsymbol{U}_2 = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Psi} \tag{8.8.67}$$

式 (8.8.67) 启迪了基本 ESPRIT 算法的另一种算法。

算法 8.8.6 (基本 ESPRIT 算法 2)

步骤 1 计算阵列协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}_{xx}$ 的特征值分解 $\hat{\boldsymbol{R}}_{xx} = \hat{\boldsymbol{U}}\boldsymbol{\Sigma}\hat{\boldsymbol{U}}^{\mathrm{H}}$。

步骤 2 矩阵 $\hat{\boldsymbol{U}}$ 与 $\hat{\boldsymbol{R}}_{xx}$ 的 p 个主特征值对应的部分组成 $\hat{\boldsymbol{U}}_s$。

步骤 3 抽取 $\hat{\boldsymbol{U}}_s$ 的前面 $m-1$ 行组成矩阵 $\hat{\boldsymbol{U}}_1$，后面 $m-1$ 行组成矩阵 $\hat{\boldsymbol{U}}_2$。计算 $\boldsymbol{\Psi} = (\hat{\boldsymbol{U}}_1^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{U}}_1)^{-1}\hat{\boldsymbol{U}}_1^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{U}}_2$ 的特征值分解。矩阵 $\boldsymbol{\Psi}$ 的特征值 $\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega_i}(i=1,2,\cdots,p)$ 给出估计值 $\hat{\omega}_i$, $i=1,2,\cdots,p$。

ESPRIT 方法在通信信号处理尤其是在空时二维处理中有着重要的应用，感兴趣的读者可参考文献 [523]。

8.9 Rayleigh 商

在物理和信息科学技术中，常常会遇到 Hermitian 矩阵的二次型函数的商的最大化或者最小化。这种商有两种形式，它们分别是一个 Hermitian 矩阵的 Rayleigh 商 (有时也叫 Rayleigh-Ritz 比) 和两个 Hermitian 矩阵的广义 Rayleigh 商 (或广义 Rayleigh-Ritz 比)。

8.9.1 Rayleigh 商

在研究振动系统的小振荡时，为了找到合适的广义坐标，Rayleigh 于 1930 年代提出了一种特殊形式的商 [384]，被后人称为 Rayleigh 商。下面是现在被广泛采用的 Rayleigh 商定义。

定义 8.9.1 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{n\times n}$ 的 Rayleigh 商或 Rayleigh-Ritz 比 $R(\boldsymbol{x})$ 是一个标量，定义为

$$R(\boldsymbol{x}) = R(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}) = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}} \tag{8.9.1}$$

其中，$\boldsymbol{x}$ 是待选择的向量，其目的是使 Rayleigh 商最大化或者最小化。

Rayleigh 商的重要性质如下 [355],[356],[81],[211]。

性质 1 (齐次性) 若 α 和 β 为标量，则

$$R(\alpha\boldsymbol{x}, \beta\boldsymbol{A}) = \beta R(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{A}) \tag{8.9.2}$$

证明 根据定义 8.9.1，易知

$$R(\alpha\boldsymbol{x},\beta\boldsymbol{A})=\frac{\alpha^*\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\beta\boldsymbol{A}\alpha\boldsymbol{x}}{\alpha^*\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\alpha\boldsymbol{x}}=\beta R(\boldsymbol{x},\boldsymbol{A})$$

这即是需要的结果。 ■

性质 2 (平移不变性)

$$R(\boldsymbol{x},\boldsymbol{A}-\alpha\boldsymbol{I})=R(\boldsymbol{x},\boldsymbol{A})-\alpha \tag{8.9.3}$$

证明 直接计算 Rayleigh 商，得

$$R(\boldsymbol{x},\boldsymbol{A}-\alpha\boldsymbol{I})=\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A}-\alpha\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}=\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}-\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\alpha\boldsymbol{I}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}=R(\boldsymbol{x},\boldsymbol{A})-\alpha$$

这就证明了本性质。 ■

性质 3 (正交性)

$$\boldsymbol{x}\perp(\boldsymbol{A}-R(\boldsymbol{x})\boldsymbol{I})\boldsymbol{x} \tag{8.9.4}$$

证明 由定义 8.9.1 知 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=R(\boldsymbol{x})\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$，或写作 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{A}-R(\boldsymbol{x})\boldsymbol{I}]\boldsymbol{x}=0$，即有 $\boldsymbol{x}\perp(\boldsymbol{A}-R(\boldsymbol{x})\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}$。 ■

性质 4 (有界性) 当向量 $\boldsymbol{x}$ 在所有非零向量的范围变化时，Rayleigh 商 $R(\boldsymbol{x})$ 落在一复平面的区域 (称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的值域) 内。这一区域是闭合的、有界的和凸的。若 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermitian 的，即满足 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，则这一区域是一个闭区间 $[\lambda_1,\lambda_n]$。

性质 5 (最小残差) 对于所有向量 $\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}$ 和所有标量 μ，恒有

$$\|[\boldsymbol{A}-R(\boldsymbol{x})\boldsymbol{I}]\boldsymbol{x}\|\leqslant\|[\boldsymbol{A}-\mu\boldsymbol{I}]\boldsymbol{x}\| \tag{8.9.5}$$

关于有界性，可进一步参考文献 [299]。

Hermitian 矩阵的 Rayleigh 商的有界性可以用下面的定理严格叙述。

定理 8.9.1 (Rayleigh-Ritz 定理) 令 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 是 Hermitian 的，并令 $\boldsymbol{A}$ 的特征值按递增次序

$$\lambda_{\min}=\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_{n-1}\leqslant\lambda_n=\lambda_{\max} \tag{8.9.6}$$

排列，则

$$\boxed{\max_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}=\max_{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=1}\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}=\lambda_{\max},\quad \text{若 } \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\max}\boldsymbol{x}} \tag{8.9.7}$$

$$\boxed{\min_{\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}=\min_{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=1}\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}=\lambda_{\min},\quad \text{若 } \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\min}\boldsymbol{x}} \tag{8.9.8}$$

更一般地，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的所有特征向量和特征值分别称为 Rayleigh 商 $R(\boldsymbol{x})$ 的临界点 (critical point) 和临界值 (critical value)。

这个定理的证明方法有多种，例如参考文献 [184]，[211]，[95]。下面采用的是文献 [184] 的证明方法。

证明　若 $\boldsymbol{x}\neq \mathbf{0}$，则

$$\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}=\left(\frac{\boldsymbol{x}}{\sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}}\right)^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\left(\frac{\boldsymbol{x}}{\sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}}\right)$$

和

$$\left(\frac{\boldsymbol{x}}{\sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}}\right)^{\mathrm{H}}\left(\frac{\boldsymbol{x}}{\sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}}\right)=1$$

于是，Rayleigh 商具有下面的等价表示：

$$\left.\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}\right|_{\boldsymbol{x}\neq 0}=\left.\frac{\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\tilde{\boldsymbol{x}}}{\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{x}}}\right|_{\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{x}}=1}\tag{8.9.9}$$

式中，$\tilde{\boldsymbol{x}}=\dfrac{\boldsymbol{x}}{\sqrt{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}}$ 是具有单位范数 $\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{x}}=1$ 的向量。式 (8.9.9) 表明，在使 Rayleigh 商最小化或者最大化时，可以选择具有单位范数的向量 $\boldsymbol{x}$。

因为 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermitian 矩阵，所以存在一个酉矩阵 $\boldsymbol{U}$，使得 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$，其中，$\boldsymbol{\Lambda}=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n)$。对于任一列向量 $\boldsymbol{x}\in C^n$，我们有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}&=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Lambda}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})\\&=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\left|(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})_i\right|^2\end{aligned}$$

由于每一项 $\left|(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})_i\right|$ 都是非负的，故有

$$\lambda_{\min}\sum_{i=1}^{n}|(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})_i|^2\leqslant \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i|(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})_i|^2\leqslant\lambda_{\max}\sum_{i=1}^{n}|(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})_i|^2$$

注意到 $\boldsymbol{U}$ 是酉矩阵，又有

$$\sum_{i=1}^{n}\left|(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})_i\right|^2=\sum_{i=1}^{n}|x_i|^2=\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

这就证明了

$$\lambda_{\min}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\leqslant\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\leqslant\lambda_{\max}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\tag{8.9.10}$$

若选择向量 $\boldsymbol{x}$ 是与 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小特征值 $\lambda_{\min}$ 相对应的特征向量，则

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\min}\boldsymbol{x}\Longrightarrow\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\min}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

故式 (8.9.10) 第一个不等式取等号的条件是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\min}\boldsymbol{x}$。类似地，若选择向量 $\boldsymbol{x}$ 是与 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最大特征值 $\lambda_{\min}$ 相对应的特征向量，则

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\max}\boldsymbol{x}\Longrightarrow\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\max}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

即式 (8.9.10) 第二个不等式取等号的条件是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\max}\boldsymbol{x}$。

由于内积 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}$ 为标量，故式 (8.9.10) 可等价写作

$$\lambda_{\min} \leqslant \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}} \leqslant \lambda_{\max}$$

第一个不等式取等号的条件是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda_{\min}\boldsymbol{x}$；第二个不等式取等号的条件是 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda_{\max}\boldsymbol{x}$。这就完成了定理的证明。 ■

下面考虑 Rayleigh 商的梯度与 Hessian 矩阵 (即梯度的梯度)[211],[95]。为简便计，将 Rayleigh 商 $R(\boldsymbol{x})$ 简记作 R。

Rayleigh 商的梯度为

$$\nabla_{\boldsymbol{x}} = \frac{\partial R}{\partial \boldsymbol{x}} = \frac{2}{\|\boldsymbol{x}\|_2^2}(\boldsymbol{A} - R\boldsymbol{I})\boldsymbol{x} \tag{8.9.11}$$

而 Rayleigh 商的 Hessian 矩阵为

$$\boldsymbol{H}_R = \frac{\partial^2 R}{\partial \boldsymbol{x}\partial \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}} = \frac{2}{\|\boldsymbol{x}\|_2^2}\left[\boldsymbol{A} - \nabla_{\boldsymbol{x}}(R)\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{x}\nabla_{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{T}}(R)\boldsymbol{x} - R\boldsymbol{I}\right] \tag{8.9.12}$$

令 $\boldsymbol{u}_i, \lambda_i, i = 1, 2, \cdots, n$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量和特征值，即它们分别是 Rayleigh 商的临界点和临界值，即有

$$R(\boldsymbol{u}_i) = \lambda_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{8.9.13}$$

计算 Hessian 矩阵在临界点 $\boldsymbol{u}_i$ 的值，易得

$$\boldsymbol{H}_R(\boldsymbol{u}_i) = \boldsymbol{A} - \lambda_i \boldsymbol{I}, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{8.9.14}$$

由式 (8.9.14) 可得两个重要结果：

(1) Hessian 矩阵的行列式

$$\det[\boldsymbol{H}_R(\boldsymbol{u}_i)] = \det(\boldsymbol{A} - \lambda_i \boldsymbol{I}) = 0 \tag{8.9.15}$$

因为 $\boldsymbol{A} - z\boldsymbol{I}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征多项式。上式意味着 Hessian 矩阵 $\boldsymbol{H}_R(\boldsymbol{u}_i)$ 对于所有临界点 $\boldsymbol{u}_i$ 都是奇异矩阵。

(2) 用向量 $\boldsymbol{u}_j$ 右乘式 (8.9.14)，立即有

$$\boldsymbol{H}_R(\boldsymbol{u}_i)\boldsymbol{u}_j = (\boldsymbol{A} - \lambda_i \boldsymbol{I})\boldsymbol{u}_j = \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_j - \lambda_i \boldsymbol{u}_j = \lambda_j \boldsymbol{u}_j - \lambda_i \boldsymbol{u}_j$$

因为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_j = \lambda_j \boldsymbol{u}_j$。上式即是

$$\boldsymbol{H}_R(\boldsymbol{u}_i)\boldsymbol{u}_j = \begin{cases} 0, & j = i \\ (\lambda_j - \lambda_i)\boldsymbol{u}_j, & j \neq i \end{cases} \tag{8.9.16}$$

这说明，由 Rayleigh 商的临界点计算得到的 Hessian 矩阵 $\boldsymbol{H}_R(\boldsymbol{u}_i)$ 与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的特征向量，但特征值不同。此外，由于 $\lambda_j - \lambda_{\min} \geqslant 0$，故只有在临界点 $\boldsymbol{u}_{\min}$ 的 Hessian 矩阵是半正定的，满足 $\boldsymbol{H}_R(\boldsymbol{u}_{\min}) \geqslant 0$。

关于 Rayleigh 商，还有下面的重要定理 [270]。

定理 8.9.2 (Courant-Fischer 定理) 令 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 为 Hermitian 矩阵，其特征值为 $\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n$，则 λ_k $(1\leqslant k\leqslant n)$ 服从关系式

$$\lambda_k=\min_{S,\dim(S)=n-k+1}\ \max_{\boldsymbol{x}\in S,\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\left\{\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}\right\}\tag{8.9.17}$$

证明 令 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 对应的特征向量，并且它们组成子空间 S 的一组标准正交基，即 $S=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n\}$。又令 $\mu(S)=\max\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}/(\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})$ 表示 Rayleigh 商在子空间 S 的所有非零向量范围内的极大值。若 S_k 是由前 k 个特征向量张成的子空间，即 $S_k=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_k\}$，则 k 维向量空间 S_k 是 n 维向量空间 S 的子空间，这意味着在 S 和 S_k 的交集中存在非零向量 $\boldsymbol{x}$。因此，向量 $\boldsymbol{x}$ 是 S_k 的基向量的线性组合，即 $\boldsymbol{x}=\sum\limits_{i=1}^{k}\alpha_i\boldsymbol{x}_i$。于是，易得

$$\mu(S)=\max_{\boldsymbol{x}\in S,\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}=\frac{\sum\limits_{i=1}^{k}\lambda_i|\alpha_i|^2}{\sum\limits_{i=1}^{k}|\alpha_i|^2}\geqslant\lambda_k$$

即 $\max\limits_{\boldsymbol{x}\in S,\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\dfrac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}\geqslant\lambda_k$。

类似地，由于 $n-k+1$ 维子空间 $S_0=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_{k+1},\boldsymbol{u}_{k+2},\cdots,\boldsymbol{u}_n\}$ 也是 n 维向量空间 S 的子空间，所以交集 $S_0\cap S$ 中的向量 $\boldsymbol{x}$ 可以表示为线性组合 $\boldsymbol{x}=\sum\limits_{i=k}^{n}\alpha_i\boldsymbol{u}_i$，从而有

$$\mu(S_0)=\min_{\boldsymbol{x}\in S_0,\dim(S_0)=n-k+1}\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}=\frac{\sum\limits_{i=k}^{n}\lambda_i|\alpha_i|^2}{\sum\limits_{i=k}^{n}|\alpha_i|^2}\leqslant\lambda_k$$

综合 $\mu(S)\geqslant\lambda_k$ 和 $\mu(S_0)\leqslant\lambda_k$，即得到式 (8.9.17)。 ■

Courant-Fisher 定理也称 Courant-Fisher 极小 - 极大定理或极小 - 极大原理 (min-max principle)。事实上，除了式 (8.9.17) 外，Courant-Fisher 定理还有其他三种表示形式，例如极大 - 极小原理为

$$\lambda_k=\max_{S,\dim S=k}\ \min_{\boldsymbol{x}\in S,\boldsymbol{x}\neq\boldsymbol{0}}\left\{\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}\right\}\tag{8.9.18}$$

另外，如果特征值按照递增次序排列为 $\lambda_1\leqslant\lambda_2\cdots\leqslant\lambda_n$，则 Rayleigh 商的极小 - 极大原理和极大 - 极小原理分别与式 (8.9.17) 和式 (8.9.18) 有所不同。这一点希望加以注意。

下面介绍 Rayleigh 商的几种典型应用。

8.9.2 应用举例 1：特征滤波器

有限冲激响应 (FIR) 滤波器的最小二乘设计方法可分为两类：矩阵求逆方法 [451],[69] 以及特征方法 [455],[361],[362],[363],[333]。矩阵求逆方法由 Tufts 与 Francis 于 1970 年提

出，它利用矩阵求逆，求解线性方程组，得到滤波器系数。特征方法由 Vaidynathan 与 Nguyen[455] 于 1987 年提出，它将滤波器系数向量的求解转换为一个实对称的正定矩阵的特征向量的计算。

设一个因果的 N 阶 FIR 滤波器的传递函数为

$$H(z)=\sum_{n=0}^{N}h(n)z^{-n} \tag{8.9.19}$$

滤波器称为具有线性相位，若其相位响应是频率的线性函数。这里考虑滤波器的幅值响应的设计。

无论滤波器的长度 N 取偶或奇数，也无论滤波器冲激响应 $h(n)$ 是否对称，滤波器的幅值响应 $A(\omega)$ 都可以表示为

$$A(\omega)=\sum_{n=1}^{M}a_n p(\omega,n) \tag{8.9.20}$$

式中，$p(\omega,n)$ 是一个合适选择的三角函数，系数 a_n 与滤波器的冲激响应 $h(n)$ 有关。

定义

$$\boldsymbol{a}=[a_1,a_2,\cdots,a_M]^{\mathrm{T}} \tag{8.9.21}$$

$$\boldsymbol{p}(\omega)=[p(\omega,1),p(\omega,2),\cdots,p(\omega,M)]^{\mathrm{T}} \tag{8.9.22}$$

则式 (8.9.20) 可以写作

$$A(\omega)=\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}(\omega)=\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}(\omega)\boldsymbol{a} \tag{8.9.23}$$

滤波器设计问题的提法是：给定期望幅值响应 $D(\omega)$，求系数向量 $\boldsymbol{a}$，使得由式 (8.9.23) 设计的幅值响应 $A(\omega)$ 尽可能逼近 $D(\omega)$。

Tufts 与 Francis 提出使用下列目标函数 [451]

$$\begin{aligned}J_{\mathrm{TF}}(\boldsymbol{a})&=\int_{\omega\in R}[D(\omega)-A(\omega)]^2\mathrm{d}\omega\\&=\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{\mathrm{TF}}\boldsymbol{a}-2\boldsymbol{q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}+d\end{aligned} \tag{8.9.24}$$

式中，$R=[0,2\pi]$ 表示一角频率闭区间，并且

$$\boldsymbol{Q}_t=\int_{\omega\in R}\boldsymbol{p}(\omega)\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}(\omega)\mathrm{d}\omega \tag{8.9.25}$$

$$\boldsymbol{q}=\int_{\omega\in R}D(\omega)\boldsymbol{p}(\omega)\mathrm{d}\omega \tag{8.9.26}$$

$$d=\int_{\omega\in R}D^2(\omega)\mathrm{d}\omega \tag{8.9.27}$$

由 $\dfrac{\partial J_{\mathrm{TF}}(\boldsymbol{a})}{\partial\boldsymbol{a}}=0$，立即得

$$2\boldsymbol{Q}_{\mathrm{TF}}\boldsymbol{a}-2\boldsymbol{q}=\boldsymbol{0}$$

或者

$$\boldsymbol{a}_{\mathrm{TF}} = \boldsymbol{Q}_{\mathrm{TF}}^{-1}\boldsymbol{q} \tag{8.9.28}$$

由于系数向量 $\boldsymbol{a}_{\mathrm{TF}}$ 可以通过矩阵求逆和上式得到，所以 Tufts 和 Francis 的设计方法称为矩阵求逆方法。

在文献 [455] 中，Vaidynathan 与 Nguyen 提出使用目标函数

$$J_{\mathrm{VN}}(\boldsymbol{a}) = \int_{\omega\in R}\left|\frac{D(\omega)}{D(\omega_0)}A(\omega_0) - A(\omega)\right|^2 \mathrm{d}\omega \tag{8.9.29}$$

式中，ω_0 为满足 $D(\omega_0)\neq 0$ 的参考频率点。利用式 (8.9.23)，上述目标函数又可重新写作

$$\begin{aligned} J_{\mathrm{VN}}(\boldsymbol{a}) &= \int_{\omega\in R}\left|\frac{D(\omega)}{D(\omega_0)}\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}(\omega_0) - \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}(\omega)\right|^2 \mathrm{d}\omega \\ &= \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{\mathrm{VN}}\boldsymbol{a} \end{aligned} \tag{8.9.30}$$

式中

$$\boldsymbol{Q}_{\mathrm{VN}} = \int_{\omega\in R}\left(\frac{D(\omega)}{D(\omega_0)}\boldsymbol{p}(\omega_0) - \boldsymbol{p}(\omega)\right)\left(\frac{D(\omega)}{D(\omega_0)}\boldsymbol{p}(\omega_0) - \boldsymbol{p}(\omega)\right)^{\mathrm{T}} \mathrm{d}\omega \tag{8.9.31}$$

由定义知，矩阵 $\boldsymbol{Q}_{\mathrm{VN}}$ 是一个实对称的正定矩阵。

令 $\dfrac{J_{\mathrm{DN}}(\boldsymbol{a})}{\partial\boldsymbol{a}} = 0$，得 $\boldsymbol{Q}_{\mathrm{VN}}\boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$，只有平凡解 $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{0}$。为了避免这种平凡解，最简单和最有效的做法是将无约束的最优化问题 $\min J_{\mathrm{VN}}(\boldsymbol{a}) = \min \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{\mathrm{VN}}\boldsymbol{a}$ 变成下列有约束的最优化问题

$$\min \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{\mathrm{VN}}\boldsymbol{a} \tag{8.9.32}$$

约束条件为

$$\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a} = 1$$

很显然，这一个带约束的最优化问题又可等价写作

$$\min R(\boldsymbol{a}) = \min\left\{\frac{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_{\mathrm{VN}}\boldsymbol{a}}{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}}\right\} \tag{8.9.33}$$

这是一个典型的 Rayleigh 商的最小化问题。因此，系数向量 $\boldsymbol{a}$ 等于实对称的正定矩阵 $\boldsymbol{Q}_{\mathrm{VN}}$ 与最小特征值对应的特征向量。由于系数向量的确定转换为实对称正定矩阵的特征向量计算，故 Vaidynathan 与 Nguyen 的滤波器设计方法称为特征滤波器方法，而由此方法设计的滤波器称为特征滤波器 (eigenfilter)。

一个实对称矩阵的最小特征向量可以利用前面介绍的共轭梯度法或者 Rayleigh 商迭代法计算。

2001 年，Pei 与 Tseng[363] 提出了一种新的特征滤波器，它基于总体最小二乘误差准

则

$$\begin{aligned}J(\boldsymbol{a}) &= \int_{\omega\in R} \frac{[D(\omega)-A(\omega)]^2}{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}+1}\mathrm{d}\omega \\ &= \int_{\omega\in R} \frac{[D(\omega)-\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}(\omega)]^2}{\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}+1}\mathrm{d}\omega \\ &= \frac{\hat{\boldsymbol{A}}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}\hat{\boldsymbol{A}}}{\hat{\boldsymbol{A}}^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{A}}}\end{aligned} \tag{8.9.34}$$

式中，$\hat{\boldsymbol{A}} = [\boldsymbol{a}, -1]^{\mathrm{T}}, \hat{\boldsymbol{p}}(\omega) = [\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}(\omega), D(\omega)]^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{Q} = \int_{\omega\in R}\hat{\boldsymbol{p}}(\omega)\hat{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{T}}(\omega)\mathrm{d}\omega$。就是说，待求的向量 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 为矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的与最小特征值对应的特征向量。若令矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的特征值分解为

$$\boldsymbol{Q} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_M]\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & 0\\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_M\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{u}_2^{\mathrm{T}}\\ \vdots\\ \boldsymbol{u}_M^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} \tag{8.9.35}$$

式中，$\lambda_1 \geqslant \lambda_2 \geqslant \cdots \geqslant \lambda_M$，则有

$$\hat{\boldsymbol{A}} = \boldsymbol{u}_M = \begin{bmatrix}\boldsymbol{y}\\ u(M,M)\end{bmatrix} \tag{8.9.36}$$

由上式及 $\hat{\boldsymbol{A}} = [\boldsymbol{a}, -1]^{\mathrm{T}}$，立即得

$$\boldsymbol{a} = -\boldsymbol{y}/u(M,M) \tag{8.9.37}$$

这恰好与总体最小二乘问题的最小范数解具有相同的形式。因此，按照以上方法设计的滤波器在文献 [363] 中被称为特征滤波器设计的总体最小二乘方法。这种方法具有以下特点：

(1) 与矩阵求逆方法相比，特征滤波器系数向量的计算数值稳定性更好。

(2) 新的特征滤波器避免了参考频率点的选择。

(3) 由于采用了总体最小二乘方法，新特征滤波器的解比直接求解实对称矩阵的与最小特征值对应的特征向量具有更好的精度。

8.9.3 应用举例 2：快速最大似然序列解码

在无线通信中，最大似然序列解码是一种最优解码方法，但存在指数复杂度的计算量。以多载波直接序列码分多址 (MC-DS-CDMA) 为例，若采用频域扩频编码技术，并且一个码元通过串并转换，变成 $M = QD$ 个子载波，其中，Q 为子码元流个数，D 是每个子码元流的载波个数。此时，在每一个子码元流，发射信号向量 $\boldsymbol{s} = [s_0, s_1, \cdots, s_{D-1}]^{\mathrm{T}}$ 的最大似然序列解码为 [305]

$$\boldsymbol{s}_{\mathrm{ML}} = \arg\min_{g=1,2,\cdots,G}\left\|E\mathrm{diag}(\boldsymbol{h})\left(\boldsymbol{W}\boldsymbol{s}_g/\sqrt{D}\right) - \boldsymbol{r}\right\|_2^2 \tag{8.9.38}$$

式中，$G = 2^D$，E 为发射信号的能量，$\boldsymbol{h} = [h_0, h_1, \cdots, h_{D-1}]^{\mathrm{T}}$ 为等效子载波增益向量，$\boldsymbol{W}$ 为 Walsh–Hadamard 编码矩阵 (即第 2 章的 Hadamard 矩阵)，而 $\boldsymbol{r}$ 为接收信号向量，以

上各量均为已知。显然，最大似然序列解码是一种无方向的穷举搜索，它需要搜索所有 $G=2^D$ 个可能的二进制码向量，才能确定最优的解，因而具有指数复杂度的搜索量。当 $D=16$ 时，最大似然序列解码因计算量太大，而变得不现实。

为了克服最大似然序列解码的这一瓶颈困难，Yang 与 Zhang 最近提出了一种快速最大似然序列解码方法 [487]。这一方法的基本思想就是利用对称矩阵的特征值分解，将无方向搜索变成沿着特征向量方向的有方向搜索。

定义

$$\boldsymbol{B}=E\text{diag}(\boldsymbol{h})\frac{1}{\sqrt{D}}\boldsymbol{W} \tag{8.9.39}$$

则式 (8.9.38) 中最大似然方法的代价函数可以简写为

$$J(\boldsymbol{s})=\|\boldsymbol{B}\boldsymbol{s}-\boldsymbol{r}\|_2^2 \tag{8.9.40}$$

因此，最大似然方法旨在使向量的 Euclidean 距离最小化。

利用 Hadamadard 矩阵的正交性 $\frac{1}{D}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}=\frac{1}{D}\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{I}$ 以及对称性 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{W}$，由矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的定义，易求得其逆矩阵

$$\boldsymbol{B}^{-1}=\frac{1}{E\sqrt{D}}\boldsymbol{W}\text{diag}(h_0^{-1},h_1^{-1},\cdots,h_{D-1}^{-1}) \tag{8.9.41}$$

定义新向量

$$\tilde{\boldsymbol{r}}=\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{r}=\frac{1}{E\sqrt{D}}\boldsymbol{W}\text{diag}(h_0^{-1},h_1^{-1},\cdots,h_{D-1}^{-1})\boldsymbol{r} \tag{8.9.42}$$

将上式代入式 (8.9.40)，立即有

$$J(\boldsymbol{s})=\|\boldsymbol{B}\boldsymbol{s}-\boldsymbol{B}\tilde{\boldsymbol{r}}\|_2^2=\|\boldsymbol{B}(\tilde{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{s})\|_2^2 \tag{8.9.43}$$

由 Hadamard 矩阵的正交性，并注意到向量范数相对于正交矩阵具有不变性，故上式又可等价写作

$$J(\boldsymbol{s})=\left\|\frac{1}{\sqrt{D}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{B}(\tilde{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{s})\right\|_2^2=\|\boldsymbol{A}(\tilde{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{s})\|_2^2 \tag{8.9.44}$$

式中

$$\boldsymbol{A}=\frac{1}{\sqrt{D}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{B} \tag{8.9.45}$$

为对称矩阵, 因为 Hadamard 矩阵 $\boldsymbol{W}$ 和矩阵 $\boldsymbol{B}$ 均为对称矩阵。

令 $D\times D$ 对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值 $\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_D$。根据 Rayleigh 商的性质，立即知

$$\lambda_1\leqslant\frac{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{c}\|_2^2}{\|\boldsymbol{c}\|_2^2}\leqslant\lambda_D$$

或写作

$$\lambda_1\|\boldsymbol{c}\|_2^2\leqslant\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{c}\|_2^2\leqslant\lambda_D\|\boldsymbol{c}\|_2^2 \tag{8.9.46}$$

综合式 (8.9.44) 和式 (8.9.46) 知，当向量 $\boldsymbol{c}=\tilde{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{s}$ 取作矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量时，代价函数 $J(\boldsymbol{s})=\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{c}\|_2^2$ 可能的极小值依次为 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_D$。因此，应该沿着矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量方向搜索使代价函数最小化的向量 $\boldsymbol{c}=\tilde{\boldsymbol{r}}-\boldsymbol{s}$，从而得到相应的解码结果 $\boldsymbol{s}$。这样一来，最大似然序列解码便变成了沿着对称矩阵 $\boldsymbol{A}=\dfrac{1}{\sqrt{D}}\boldsymbol{W}\boldsymbol{B}$ 的特征向量方向进行搜索的有方向搜索。需要注意的是，由于加性噪声和其他用户信号的干扰，搜索得到的解向量只是一个粗估计，还应该进一步细化，以便获得最优的解码向量。对整个快速最大似然序列解码方法感兴趣的读者，可参考文献 [487]。

8.9.4 Rayleigh 商迭代

令 $\boldsymbol{A}\in C^{n\times n}$ 是一个可对角化的矩阵，其特征值为 λ_i，与之对应的特征向量为 $\boldsymbol{u}_i$。为方便计，假定矩阵 $\boldsymbol{A}$ 非奇异，第一个特征值比其他特征值都大，并且 $\lambda_1>\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_n$，则特征值 λ_1 和与之对应的特征向量 $\boldsymbol{u}_1$ 分别称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的主特征值和主特征向量。

乘幂法使用

$$\boldsymbol{x}_k=\frac{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{k-1}}{\|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{k-1}\|_2}=\frac{\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{x}_0}{\|\boldsymbol{A}^k\boldsymbol{x}_0\|_2} \tag{8.9.47}$$

迭代计算向量 $\boldsymbol{x}$，同时希望它收敛为主特征向量，即

$$\lim_{k\to\infty}\boldsymbol{x}_k=\lambda\frac{\boldsymbol{u}_1}{\|\boldsymbol{u}_1\|}\quad \text{对某个满足 } |\lambda|=1 \text{ 的复常数 } \lambda \tag{8.9.48}$$

乘幂法的魅力在于它的简单性，而非计算有效性。

Rayleigh 观察到 $\lambda_i=R(\boldsymbol{x}_i)$，并提出了当矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是 Hermitian 矩阵时，计算其主特征值和主特征向量的迭代方法，现在习惯称之为 Rayleigh 商迭代。

Rayleigh 商迭代是逆迭代的一种变型，其标准算法如下：

选择一个单位长度的初始向量 $\boldsymbol{x}_0$，对 $k=0,1,2,\cdots$ 执行以下运算。

(1) 构造 $R_k=R(\boldsymbol{x}_k)=\boldsymbol{x}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k$。

(2) 若 $(\boldsymbol{A}-R_k\boldsymbol{I})$ 奇异，则求 $(\boldsymbol{A}-R_k\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}_{k+1}=\boldsymbol{0}$ 的非零解 $\boldsymbol{x}_{k+1}\neq\boldsymbol{0}$，并停止迭代。若 $(\boldsymbol{A}-R_k\boldsymbol{I})$ 非奇异，则继续下面的运算。

(3) 计算

$$\boldsymbol{x}_{k+1}=\frac{[(\boldsymbol{A}_k-R_k)\boldsymbol{I}]^{-1}\boldsymbol{x}_k}{\|[(\boldsymbol{A}_k-R_k)\boldsymbol{I}]^{-1}\boldsymbol{x}_k\|} \tag{8.9.49}$$

迭代结果 $\{R_k,\boldsymbol{x}_k\}$ 称为由 Rayleigh 迭代产生的 Rayleigh 序列。

Rayleigh 序列具有以下性质 [355]。

(1) 尺度不变性：矩阵 $\alpha\boldsymbol{A}$ $(\alpha\neq 0)$ 产生与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 相同的 Rayleigh 序列。

(2) 平移不变性：矩阵 $\boldsymbol{A}-\alpha\boldsymbol{I}$ 产生的 Rayleigh 序列为 $\{R_k-\alpha,\boldsymbol{x}_k\}$。

(3) 酉相似性：矩阵 $\boldsymbol{U}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$ ($\boldsymbol{U}$ 是酉矩阵) 产生的 Rayleigh 序列为 $\{R_k,\boldsymbol{U}\boldsymbol{x}_k\}$。

Rayleigh 商迭代算法还有下面的推广 [355]，它适用于一般矩阵 $\boldsymbol{A}$。

选择一个单位长度的初始向量 $\boldsymbol{x}_0$，并针对 $k=0,2,4,\cdots$ 执行下面的迭代运算。

(1) 构造 $R_k = R(\boldsymbol{x}_k)$。

(2) 求解 $\boldsymbol{x}_{k+1}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{A} - R_k\boldsymbol{I}) = \tau_k\boldsymbol{x}_k^{\mathrm{H}}$，并使 $\|\boldsymbol{x}_{k+1}\| = 1$。

(3) 构造 $R_{k+1} = R(\boldsymbol{x}_{k+1})$。

(4) 求解 $(\boldsymbol{A} - R_{k+1}\boldsymbol{I})\boldsymbol{x}_{k+2} = \tau_{k+1}\boldsymbol{x}_{k+1}$，并使 $\|\boldsymbol{x}_{k+2}\| = 1$。

如果碰巧 $(\boldsymbol{A} - R_k\boldsymbol{I})$ 或者 $(\boldsymbol{A} - R_{k+1}\boldsymbol{I})$ 奇异，则求解齐次方程，直接得到相应的特征向量。若矩阵 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，则上述推广算法退化为原标准 Rayleigh 商迭代方法。

8.9.5 Rayleigh 商问题求解的共轭梯度算法

取 Rayleigh 商的梯度的负方向作为向量 $\boldsymbol{x}$ 的梯度流，即

$$\dot{\boldsymbol{x}} = -[\boldsymbol{A} - R(\boldsymbol{x})\boldsymbol{I}]\boldsymbol{x} \tag{8.9.50}$$

则向量 $\boldsymbol{x}$ 可以利用梯度算法

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}_{k+1} &= \boldsymbol{x}_k + \mu\dot{\boldsymbol{x}}_k \\ &= \boldsymbol{x}_k - \mu[\boldsymbol{A} - R(\boldsymbol{x}_k)\boldsymbol{I}]\boldsymbol{x}_k\end{aligned} \tag{8.9.51}$$

迭代计算 [211]。

正如下面的定理所述，Rayleigh 商问题求解的梯度算法具有比标准 Rayleigh 商迭代算法更快的收敛速率。

定理 8.9.3 假定 $\lambda_1 > \lambda_2$。对于几乎所有满足 $\|\boldsymbol{x}_0\| = 1$ 的初始值 $\boldsymbol{x}_0$，由梯度算法迭代计算的向量 $\boldsymbol{x}_k$ 以速率 $\lambda_1 - \lambda_2$ 指数收敛为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最大特征向量 $\boldsymbol{u}_1$ 或 $-\boldsymbol{u}_1$。

证明 参见文献 [211, p.18]。

下面介绍求解 Rayleigh 商问题

$$R(\boldsymbol{x}) = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}} \tag{8.9.52}$$

的共轭梯度算法，式中，$\boldsymbol{A}$ 为实对称矩阵。

从某个初始向量 $\boldsymbol{x}_0$ 出发，共轭梯度算法使用迭代公式

$$\boldsymbol{x}_{k+1} = \boldsymbol{x}_k + \alpha_k\boldsymbol{p}_k \tag{8.9.53}$$

更新和逼近对称矩阵的最小 (或最大) 特征向量。实系数 α_k 由下式给出 [413],[491]

$$\alpha_k = \pm\frac{1}{2D}\left(-B + \sqrt{B^2 - 4CD}\right) \tag{8.9.54}$$

式中，正号适用于最小特征向量的更新，负号对应于最大特征向量的更新。

式 (8.9.54) 的参数 D, B, C 的计算公式如下。

$$D = P_b(k)P_c(k) - P_a(k)P_d(k) \tag{8.9.55}$$

$$B = P_b(k) - \lambda_k P_d(k) \tag{8.9.56}$$

$$C = P_a(k) - \lambda_k P_c(k) \tag{8.9.57}$$

$$P_a(k) = \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k/(\boldsymbol{x}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_k) \tag{8.9.58}$$

$$P_b(k) = \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k/(\boldsymbol{x}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_k) \tag{8.9.59}$$

$$P_c(k) = \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_k/(\boldsymbol{x}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_k) \tag{8.9.60}$$

$$P_d(k) = \boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_k/(\boldsymbol{x}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_k) \tag{8.9.61}$$

$$\lambda_k = R(\boldsymbol{x}_k) = \boldsymbol{x}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_k/(\boldsymbol{x}_k^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_k) \tag{8.9.62}$$

在第 $k+1$ 步迭代，搜索方向按照下列方式选择：

$$\boldsymbol{p}_{k+1} = \boldsymbol{r}_{k+1} + b(k)\boldsymbol{p}_k \tag{8.9.63}$$

式中，$b(-1) = 0$，且 $\boldsymbol{r}_{k+1}$ 为 $k+1$ 步迭代的残差向量，由

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_{k+1} &= -\frac{1}{2}\nabla_{\boldsymbol{x}^*}R(\boldsymbol{x}_{k+1}) \\ &= (\lambda_{k+1}\boldsymbol{x}_{k+1} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_{k+1})/(\boldsymbol{x}_{k+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}_{k+1})\end{aligned} \tag{8.9.64}$$

式 (8.9.63) 中的 $b(k)$ 的选择应该使搜索方向 $\boldsymbol{p}_{k+1}$ 与 $\boldsymbol{p}_k$ 是相对于 Rayleigh 商的 Hessian 矩阵 $\boldsymbol{H}$ 共轭的或者 $\boldsymbol{H}$ 正交的，即

$$\boldsymbol{p}_{k+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}\boldsymbol{p}_k = 0 \tag{8.9.65}$$

关于 $\boldsymbol{H}$ 的选择，Chen 等人 [83] 使用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 作 $\boldsymbol{H}$。此时

$$b(k) = -\frac{\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k}{\boldsymbol{p}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k} \tag{8.9.66}$$

但是，这种选择只适用于二次型目标函数 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，因为这种函数的 Hessian 矩阵等于 $\boldsymbol{A}$。

由于 Rayleigh 商不是二次型函数，直接计算 Hessian 矩阵，得 [491]

$$\boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}) = \frac{2}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\left[\boldsymbol{A} - \frac{\partial R(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} - \boldsymbol{x}\left(\frac{\partial R(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}}\right)^{\mathrm{T}} - R(\boldsymbol{x})\boldsymbol{I}\right] \tag{8.9.67}$$

式中

$$\begin{aligned}\frac{\partial R(\boldsymbol{x})}{\partial \boldsymbol{x}} &= -\frac{\boldsymbol{x}}{(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})^2}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} + \frac{2}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \\ &= -\frac{R(\boldsymbol{x})}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\boldsymbol{x} + \frac{2}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\end{aligned} \tag{8.9.68}$$

当 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_{k+1}$ 时，将 Hessian 矩阵简记为 $\boldsymbol{H}_{k+1} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{x}_{k+1})$。此时，参数

$$b(k) = -\frac{\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{H}_{k+1}\boldsymbol{p}_k}{\boldsymbol{p}_k\boldsymbol{H}_{k+1}sj\boldsymbol{p}_k} \tag{8.9.69}$$

将 $\boldsymbol{H}_{k+1}$ 代入后，得

$$b(k) = -\frac{\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k + (\boldsymbol{r}_{k+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{r}_{k+1})(\boldsymbol{x}_{k+1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{p}_k)}{\boldsymbol{p}_k^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{p}_k - \lambda_{k+1}\boldsymbol{I})\boldsymbol{p}_k} \tag{8.9.70}$$

式 (8.9.53) ~ 式 (8.9.62) 以及式 (8.9.70) 一起组成了求解 Rayleigh 商问题式 (8.9.52) 的共轭梯度算法。如果对更新的 $\boldsymbol{x}_k$ 进行归一化，并且当式 (8.9.54) 前面取正号时，算法求出的是对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最小特征值和对应的最小特征向量。若希望求 $\boldsymbol{A}$ 的最大特征值和相应的最大特征向量，则只要在式 (8.9.54) 前面取负号即可。这种算法是 Yang 等人提出的 [491]。

8.10 广义 Rayleigh 商

Rayleigh 商的推广形式称为广义 Rayleigh 商。本节讨论广义 Rayleigh 商的定义和求解方法，并以模式识别和移动通信为例，介绍广义 Rayleigh 商的典型应用。

8.10.1 广义 Rayleigh 商

定义 8.10.1 令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 $n\times n$ 维 Hermitian 矩阵，且 $\boldsymbol{B}$ 是正定矩阵。矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义 Rayleigh 商或广义 Rayleigh-Ritz 比 $R(\boldsymbol{x})$ 是一个标量 (函数)，定义为

$$R(\boldsymbol{x}) = \frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}} \tag{8.10.1}$$

其中，$\boldsymbol{x}$ 是待选择的向量，其目的是使广义 Rayleigh 商最大化或者最小化。

为了求解广义 Rayleigh 商，定义一个新向量 $\tilde{\boldsymbol{x}} = \boldsymbol{B}^{1/2}\boldsymbol{x}$，其中，$\boldsymbol{B}^{1/2}$ 表示正定矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的平方根。用 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{B}^{-1/2}\tilde{\boldsymbol{x}}$ 代入广义 Rayleigh 商定义式 (8.10.1)，则有

$$R(\tilde{\boldsymbol{x}}) = \frac{\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{H}}\left(\boldsymbol{B}^{-1/2}\right)^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{B}^{-1/2}\right)\tilde{\boldsymbol{x}}}{\tilde{\boldsymbol{x}}^{\mathrm{H}}\tilde{\boldsymbol{x}}} \tag{8.10.2}$$

这表明，矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义 Rayleigh 商等价为矩阵乘积 $(\boldsymbol{B}^{-1/2})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}^{-1/2})$ 的 Rayleigh 商。由 Rayleigh-Ritz 定理知，当选择向量 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 是与矩阵乘积 $(\boldsymbol{B}^{-1/2})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}^{-1/2})$ 的最小特征值 $\lambda_{\min}$ 对应的特征向量时，广义 Rayleigh 商取最小值 $\lambda_{\min}$；而当选择向量 $\boldsymbol{x}$ 是与矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^{-1/2})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}^{-1/2})$ 的最大特征值 $\lambda_{\max}$ 对应的特征向量时，广义 Rayleigh 商取最大值 $\lambda_{\max}$。考查矩阵乘积 $(\boldsymbol{B}^{-1/2})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}^{-1/2})$ 的特征值分解

$$\left(\boldsymbol{B}^{-1/2}\right)^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\left(\boldsymbol{B}^{-1/2}\right)\tilde{\boldsymbol{x}} = \lambda\tilde{\boldsymbol{x}} \tag{8.10.3}$$

若 $\boldsymbol{B} = \sum_{i=1}^{n}\beta_i\boldsymbol{v}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}$ 是矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的特征值分解，则

$$\boldsymbol{B}^{1/2} = \sum_{i=1}^{n}\sqrt{\beta_i}\boldsymbol{v}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}$$

并且 $\boldsymbol{B}^{1/2}\boldsymbol{B}^{1/2}=\boldsymbol{B}$。由于矩阵 $\boldsymbol{B}^{1/2}$ 和其逆矩阵 $\boldsymbol{B}^{-1/2}$ 具有相同的特征向量和互为倒数的特征值，故

$$\boldsymbol{B}^{-1/2}=\sum_{i=1}^{n}\frac{1}{\sqrt{\beta_i}}\boldsymbol{v}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}} \tag{8.10.4}$$

说明 $\boldsymbol{B}^{-1/2}$ 也是 Hermitian 矩阵，即有 $(\boldsymbol{B}^{-1/2})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{B}^{-1/2}$。

用矩阵 $\boldsymbol{B}^{-1/2}$ 左乘式 (8.10.3) 两边，并代入 $(\boldsymbol{B}^{-1/2})^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{B}^{-1/2}$，即得

$$\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{-1/2}\tilde{\boldsymbol{x}}=\lambda\boldsymbol{B}^{-1/2}\tilde{\boldsymbol{x}}\quad 或\quad \boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda\boldsymbol{x}$$

因为 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{B}^{-1/2}\tilde{\boldsymbol{x}}$。因此，矩阵乘积 $(\boldsymbol{B}^{-1/2})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{B}^{-1/2})$ 的特征值分解与矩阵 $\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}$ 的特征值分解等价。由于 $\boldsymbol{B}^{-1}\boldsymbol{A}$ 的特征值分解就是矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值分解，所以上述讨论可归结为：广义 Rayleigh 商取最大值和最小值的条件是

$$\boxed{R(\boldsymbol{x})=\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}}=\lambda_{\max},\quad 若选择\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\max}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}} \tag{8.10.5}$$

$$\boxed{R(\boldsymbol{x})=\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}}=\lambda_{\min},\quad 若选择\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\lambda_{\min}\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}} \tag{8.10.6}$$

即是说，欲使广义 Rayleigh 商最大化，向量 $\boldsymbol{x}$ 必须选取与矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 最大广义特征值对应的特征向量；反之，需要使广义 Rayleigh 商最小化时，则应该取与矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 最小广义特征值对应的特征向量作 $\boldsymbol{x}$。

8.10.2 应用举例 1：类鉴别有效性的评估

模式识别广泛应用于人的特征 (如人脸、指纹、虹膜等) 识别和各种雷达目标 (如飞机、导弹、舰船等) 识别。在这些应用中，信号特征的提取是至关重要的。例如，将目标视为一个线性系统，系统的参数就是目标信号的一种特征。又如，信号的双谱 (即三阶累积量的二维 Fourier 变换)

$$B(\omega_1,\omega_2)=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{E}\{x(t)x(t+\tau_1)x(t+\tau_2)\}\mathrm{e}^{-\mathrm{j}(\omega_1\tau_1+\omega_2\tau_2)}\mathrm{d}\tau_1\mathrm{d}\tau_2 \tag{8.10.7}$$

和 Gabor 原子 (即 Gabor 变换的基函数)

$$g_k(t)=\frac{1}{\sqrt{s_k}}g\left(\frac{t-u_k}{s_k}\right)\mathrm{e}^{\mathrm{j}\xi_k t},\quad k=1,2,\cdots,K \tag{8.10.8}$$

分别是将目标信号视为非高斯信号和非平稳信号时的特征。式中，$g(\cdot)$ 常取高斯窗函数

$$g(t)=\sqrt[4]{2}\,\mathrm{e}^{-\pi t^2} \tag{8.10.9}$$

式 (8.10.8) 中的 Gabor 原子参数 s_k,u_k,ξ_k 分别称为尺度参数、平移参数和 (频率) 调制参数。在雷达目标识别中，它们分别对应为飞机的几何尺寸、关键部位 (发动机、天线罩、进气孔等) 和蒙皮材料 (电磁辐射特性)，是飞机识别的关键特征 [417]。

通过选择对信号分类或识别贡献最大的双谱的频率集合 $\{(\omega_1^{(1)},\omega_2^{(1)}),(\omega_1^{(2)},\omega_2^{(2)}),\cdots,(\omega_1^{(K)},\omega_2^{(K)})\}$ 的双谱函数 $\{B(\omega_1^{(1)},\omega_2^{(1)}),B(\omega_1^{(2)},\omega_2^{(2)}),\cdots,B(\omega_1^{(K)},\omega_2^{(K)})\}$，便得到了目标信号的 K 维向量。由于这种向量表征信号分类的特征，称为信号的特征向量 (feature vector)。注意，它与特征值问题中的特征向量的涵义有所不同。类似地，与 K 组 Gabor 原子参数 $\{(s_1,u_1,\xi_1),(s_2,u_2,\xi_2),\cdots,(s_K,u_K,\xi_K)\}$ 对应的 Gabor 原子函数 $g_1(t),g_2(t),\cdots,g_K(t)$ 也构成了目标信号的 K 维特征向量。

表征信号分类的特征向量的提取是通过信号处理方法和神经网络的训练完成的。利用神经网络作为分类器，即可对目标进行分类与识别。以双谱特征为例，假设使用下面几种不同的方法提取了不同的双谱：

(1) 径向积分双谱 (radially integrated bispectrum，RIB) 的相位 [78]

$$\text{PRIB}(a)=\arctan\left(\frac{\text{Im}[I(a)]}{\text{Re}[I(a)]}\right) \tag{8.10.10}$$

式中，$\text{Re}[I(a)]$ 和 $\text{Im}[I(a)]$ 分别表示径向积分双谱

$$I(a)=\int_{0^+}^{1/(1+a)}B(f_1,af_1)\text{d}f_1$$

的实部和虚部。

(2) 径向积分双谱

$$\text{RIB}(a)=I(a)=\int_{0^+}^{1/(1+a)}B(f_1,af_1)\text{d}f_1 \tag{8.10.11}$$

(3) 轴向积分双谱 (axialy integrated bispectrum，AIB) [452]

$$\text{AIB}(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}B(\omega,\omega_2)\text{d}\omega_2=\frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi}B(\omega_1,\omega)\text{d}\omega_1 \tag{8.10.12}$$

(4) 圆周积分双谱 (circularly integrated biscpectrum，CIB) [280]

$$\text{CIB}(a)=\int B_p(a,\theta)\text{d}\theta \tag{8.10.13}$$

式中，$B_p(a,\theta)$ 是 $B(\omega_1,\omega_2)$ 的极坐标形式。

(5) 选择双谱 (selected bispactrum) [509] 记 $\omega=(\omega_1,\omega_2)$ 和 $B(\omega)=B(\omega_1,\omega_2)$。利用 Fisher 类鉴别测度

$$m^{(i,j)}(\omega)=\frac{\sum\limits_{l=i,j}p^{(l)}\left[\text{mean}_k\left(B_k^{(l)}(\omega)\right)-\text{mean}_l\left[\text{mean}_k\left(B_k^{(l)}(\omega)\right)\right]\right]^2}{\sum\limits_{l=i,j}\text{var}_k\left(B_k^{(l)}(\omega)\right)},\quad i\neq j \tag{8.10.14}$$

式中，$B_k^{(l)}(\omega)$ 表示由第 l 类信号的第 k 组观测数据计算得到的在频率 $\omega=(\omega_1,\omega_2)$ 处的样本双谱，$\text{mean}_k(B_k^{(l)}(\omega))$ 和 $\text{var}_k(B_k^{(l)}(\omega))$ 分别代表第 l 类信号在所有样本双谱的平均值和方差，而 $\text{mean}_l[\text{mean}_k\,(B_k^{(l)}(\omega))]$ 表示所有类型的信号在频率 ω 的样本双谱的总体中心。

有了这 5 种双谱特征向量后，我们很自然地会对评估 PRIB，RIB，AIB，CIB 和选择双谱这 5 种方法的分类能力感兴趣。散布 (divergence) 是两类信号间“距离”或不相似度的一种测度，常常用于进行特征评价和类鉴别有效性的评估。

令 Q 是待评估的几种方法抽取的信号特征向量的共同维数。对于 c 类信号的分类问题，Fisher 类鉴别测度需要比较 $c-1$ 个类鉴别函数。作为 Fisher 测度的推广，现在考虑所有 Q 维特征向量在 $c-1$ 维类鉴别空间上的投影。

令 $N = N_1 + N_2 + \cdots + N_c$，其中，$N_i$ 表示在训练阶段提取的第 i 类信号的特征向量的个数。假定

$$\boldsymbol{s}_{i,k} = [s_{i,k}(1), s_{i,k}(2), \cdots, s_{i,k}(Q)]^{\mathrm{T}}$$

表示在训练阶段由第 i 类信号的第 k 组观测数据得到的 Q 维特征向量，而

$$\boldsymbol{m}_i = [m_i(1), m_i(2), \cdots, m_i(Q)]^{\mathrm{T}}$$

为第 i 类信号的特征向量的样本均值向量，其中

$$m_i(q) = \frac{1}{N_i}\sum_{k=1}^{N_i} x_{i,k}(q), \quad i = 1, 2, \cdots, c,\ q = 1, 2, \cdots, Q$$

类似地，令

$$\boldsymbol{m} = [m(1), m(2), \cdots, m(Q)]^{\mathrm{T}}$$

表示由全体观测数据得到的所有特征向量的总体均值向量，其中

$$m(q) = \frac{1}{c}\sum_{i=1}^{c} m_i(q), \quad q = 1, 2, \cdots, Q$$

有了以上向量后，即可定义类内散布矩阵 (within-class scatter matrix) [138]

$$\boldsymbol{S}_w \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{c}\sum_{i=1}^{c}\left[\frac{1}{N_i}(\boldsymbol{s}_{i,k} - \boldsymbol{m}_i)(\boldsymbol{s}_{i,k} - \boldsymbol{m}_i)^{\mathrm{T}}\right] \tag{8.10.15}$$

和类间散布矩阵 (between-class scatter matrix) [138]

$$\boldsymbol{S}_b \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{c}\sum_{i=1}^{c}(\boldsymbol{m}_i - \boldsymbol{m})(\boldsymbol{m}_i - \boldsymbol{m})^{\mathrm{T}} \tag{8.10.16}$$

它们都是 $Q \times Q$ 矩阵。

令 Span($\boldsymbol{U}$) 为 $Q \times Q$ 矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的列张成的 Q 维子空间，并定义代价或准则函数

$$J(\boldsymbol{U}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\prod\limits_{\text{diag}} \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{U}}{\prod\limits_{\text{diag}} \boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{U}} \tag{8.10.17}$$

式中，$\prod\limits_{\text{diag}} \boldsymbol{A}$ 表示矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的对角元素的乘积。使用 J 作为评估类鉴别能力的测度，称 Span($\boldsymbol{U}$) 是类鉴别空间，若

$$\boldsymbol{U} = \arg\max_{\boldsymbol{U}\in R^{Q\times R}} J(\boldsymbol{U}) \tag{8.10.18}$$

为了求解这一非线性优化方程，将式 (8.10.17) 改写作

$$J=\frac{\prod_{i=1}^{Q}\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{u}_i}{\prod_{i=1}^{Q}\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{u}_i}=\prod_{i=1}^{Q}\frac{\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{u}_i}{\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{u}_i} \tag{8.10.19}$$

式中，$\boldsymbol{u}_i$ 是矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的第 i 列。显然，代价函数 J 最大化，当且仅当

$$\max J_i(\boldsymbol{u}_i)=\frac{\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{u}_i}{\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{u}_i} \tag{8.10.20}$$

这恰好就是广义 Rayleigh 商的最大化。上式有着明确的物理意义：构成最优类鉴别子空间的矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的列向量 $\boldsymbol{u}$ 应该同时使得类间散布最大和类内散布最小，即广义 Rayleigh 商最大化。

对于 c 类信号的分类，最优的类鉴别子空间是 $c-1$ 维的。因此，式 (8.10.20) 只需要对 $c-1$ 个广义 Rayleigh 商最大化。换言之，只需要求解广义特征值问题

$$\boldsymbol{S}_b\boldsymbol{u}_i=\lambda_i\boldsymbol{S}_w\boldsymbol{u}_i,\quad i=1,2,\cdots,c-1 \tag{8.10.21}$$

得到 $c-1$ 个广义特征向量 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_{c-1}$。这些广义特征向量构成的 $Q\times(c-1)$ 矩阵

$$\boldsymbol{U}_{c-1}=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_{c-1}] \tag{8.10.22}$$

它的列张成最优的类鉴别子空间。

获得了矩阵 $Q\times(c-1)$ 矩阵 $\boldsymbol{U}_{c-1}$ 后，即可以对在训练阶段获得的每一个信号特征向量 $\boldsymbol{s}_{i,k}$，求出它在最优类鉴别子空间的投影

$$\boldsymbol{y}_{i,k}=\boldsymbol{U}_{c-1}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{s}_{i,k},\quad i=1,2,\cdots,c,\ k=1,2,\cdots,N_i \tag{8.10.23}$$

当只有三类信号 $(c=3)$ 时，最优的类鉴别子空间是一平面，每个特征向量在最优类鉴别子空间上的投影为一个点。文献 [509] 提出了信号特征抽取的选择双谱方法，并将这一方法应用于高分辨逆合成孔径 (ISAR) 雷达的飞机目标识别。图 8.10.1~ 图 8.10.4 分别示出了对三种微波暗室测得的三种模型飞机 (B52，Q6 和 Q7) 数据使用径向积分双谱 (RIB)、轴向积分双谱 (AIB)、圆周积分双谱 (CIB) 和选择双谱时，这些双谱特征向量在最优类鉴别子空间的投影 (引自文献 [509])。

这些投影图直观地反映出不同双谱特征向量在高分辨雷达目标识别中的鉴别能力。容易看出，选择双谱方法优于其他几种双谱方法。

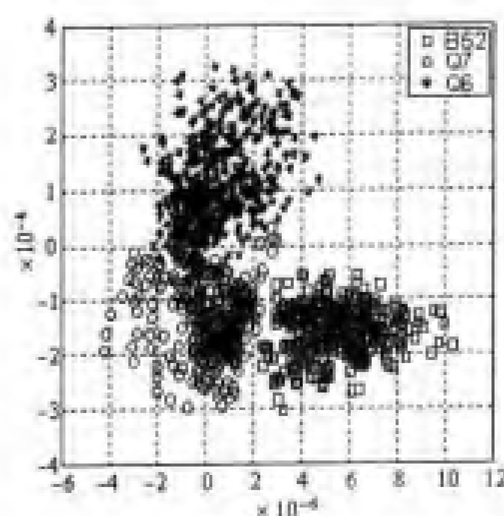


图 8.10.1 径向积分双谱在最优类鉴别子空间上的投影

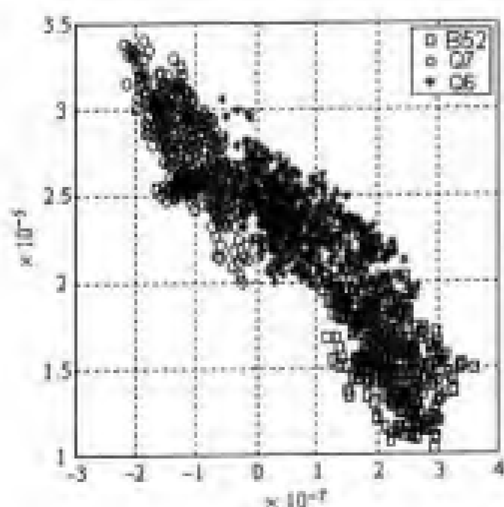


图 8.10.2 轴向积分双谱在最优类鉴别子空间上的投影

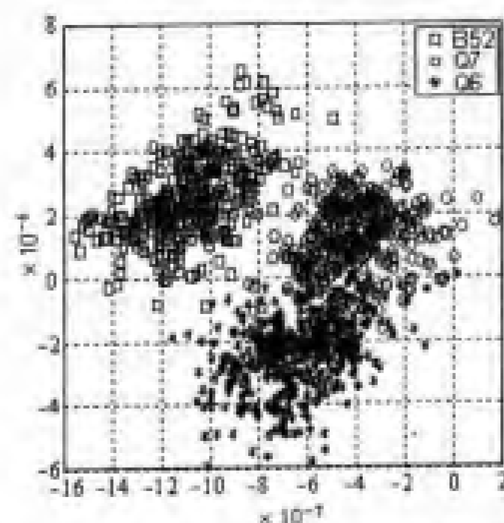


图 8.10.3 圆周积分双谱在最优类鉴别子空间上的投影

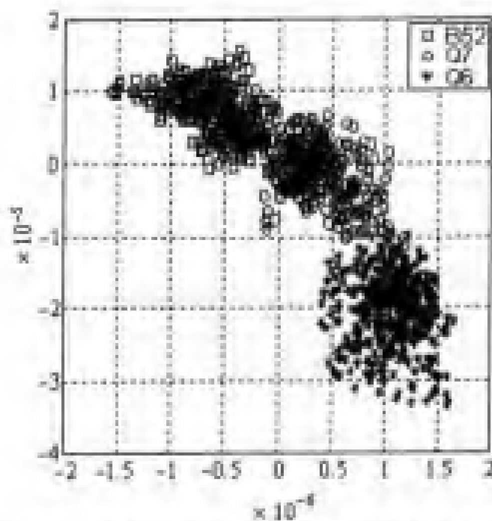


图 8.10.4 选择双谱在最优类鉴别子空间上的投影

8.10.3 应用举例 2：干扰抑制的鲁棒波束形成

在无线通信中，基站若使用由多个天线 (称为阵元) 组成的天线阵列，便可以通过空间处理，达到分离多个同信道的用户，从而检测出期望用户的信号。

考虑由 M 个全向性天线组成的阵列，并且 K 个窄带信号位于远场。由 M 个阵元接收到的观测信号向量为

$$\boldsymbol{y}(n)=\boldsymbol{d}(n)+\boldsymbol{i}(n)+\boldsymbol{e}(n) \tag{8.10.24}$$

式中，$\boldsymbol{e}(n)$ 为 M 个阵元上的加性白噪声组成的向量，而

$$\boldsymbol{d}(n)=\boldsymbol{a}(\theta_0(n))s_0(n) \tag{8.10.25}$$

$$\boldsymbol{i}(n)=\sum_{k=1}^{K-1}\boldsymbol{a}(\theta_k(n))s_k(n) \tag{8.10.26}$$

分别为 M 个阵元接收到的期望信号向量和其他 $K-1$ 个用户的干扰信号向量。其中，$\theta_0(n)$ 和 $\theta_k(n)$ 分别代表期望信号和第 k 个干扰信号的波达方向 (角)，向量 $\boldsymbol{a}(\theta_0(n))$ 和 $\boldsymbol{a}(\theta_k(n))$ 分别是期望信号和第 k 个干扰信号的阵列响应向量。

假定所有信号源彼此统计不相关，各个阵元的加性白噪声统计不相关，并且具有相同方差 σ^2。于是，观测信号的自相关矩阵为

$$\boldsymbol{R}_y=\mathrm{E}\{\boldsymbol{y}(n)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(n)\}=\boldsymbol{R}_d+\boldsymbol{R}_{i+e} \tag{8.10.27}$$

式中

$$\boldsymbol{R}_d=\mathrm{E}\{\boldsymbol{d}(n)\boldsymbol{d}^{\mathrm{H}}(n)\}=P_0\boldsymbol{a}(\theta_0)\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(\theta_0) \tag{8.10.28}$$

$$\boldsymbol{R}_{i+e}=\mathrm{E}\{[\boldsymbol{i}(n)+\boldsymbol{e}(n)][\boldsymbol{i}(n)+\boldsymbol{e}(n)]^{\mathrm{H}}\}=\sum_{k=1}^{K-1}P_k\boldsymbol{a}(\theta_k)\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(\theta_k)+\sigma^2\boldsymbol{I} \tag{8.10.29}$$

其中，常数 P_0 和 P_k 分别表示期望信号和第 k 个干扰信号的功率。

令 $\boldsymbol{w}(n)$ 是波束形成器在 n 时刻的权向量，其输出

$$z(n) = \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n)\boldsymbol{y}(n) \tag{8.10.30}$$

容易求得波束形成器输出的信干噪比 (signal-to-interference-plus-noise-ratio，SINR) 为

$$\begin{aligned}\mathrm{SINR}(\boldsymbol{w}) &= \frac{\mathrm{E}\{|\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{d}(n)|^2\}}{\mathrm{E}\{|\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}[\boldsymbol{i}(n)+\boldsymbol{e}(n)]|^2\}}\\ &= \frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_d\boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_{i+e}\boldsymbol{w}}\end{aligned} \tag{8.10.31}$$

为了达到干扰抑制之目的，应该使 Rayleigh 商 SINR ($\boldsymbol{w}$) 最大化。即是说，干扰抑制的最优波束形成器应该选择为矩阵束 $\{\boldsymbol{R}_d, \boldsymbol{R}_{i+e}\}$ 与最大广义特征值对应的广义特征向量。然而，这需要分别计算期望信号的自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_d$ 和干扰加噪声的自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_{i+e}$。这是难于直接做到的。

将 $\boldsymbol{R}_d = P_0\boldsymbol{a}(\theta_0)\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(\theta_0)$ 代入信干噪比公式 (8.10.31)，无约束最优化问题可表示为

$$\max\ \mathrm{SINR}(\boldsymbol{w}) = \max \frac{P_0|\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}(\theta_0)|^2}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_{i+e}\boldsymbol{w}} \tag{8.10.32}$$

若增加约束条件 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}(\theta_0) = 1$，则无约束最优化问题等价为下列约束最优化问题：

$$\min\ \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_{i+e}\boldsymbol{w} \quad \text{s.t.} \quad \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}(\theta_0) = 1 \tag{8.10.33}$$

式中，s.t. 表示约束条件。这个最优化问题仍然不方便求解，因为 $\boldsymbol{R}_{i+e}$ 不可能计算。

注意到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_y\boldsymbol{w} &= \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{R}_d\boldsymbol{w} + \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_{i+e})\boldsymbol{w}\\ &= P_0 + \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_{i+e}\boldsymbol{w}\end{aligned}$$

而期望信号功率 P_0 是与波束形成器无关的常数，所以式 (8.10.33) 的约束最优化问题又等价为

$$\min\ \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_y\boldsymbol{w} \quad \text{s.t.} \quad \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}(\theta_0) = 1 \tag{8.10.34}$$

与式 (8.10.33) 不同的是，观测信号向量的自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_y$ 容易估计。使用 Lagrange 乘数法，容易求出约束最优化问题 (8.10.34) 的解为

$$\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}(n) = \frac{\boldsymbol{R}_y^{-1}\boldsymbol{a}(\theta_0(n))}{\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(\theta_0(n))\boldsymbol{R}_y^{-1}\boldsymbol{a}(\theta_0(n))} \tag{8.10.35}$$

无线通信干扰抑制的这一鲁棒波束形成器是文献 [388] 提出的。

8.11 二次特征值问题

在流体力学中流量的线性稳定性研究 [61],[209]、声学系统的动态分析、结构力学中结构系统的振动分析、电路仿真 [444]、微电子力学系统 (microelectronic mechanical system, MEMS) 的数学建模 [96],[512]、生物医学信号处理、时间序列预报、语音的线性预测编码 [110]、多输入 - 多输出 (multiple input-multiple output, MIMO) 系统分析 [444]、工业应用的偏微分方程的有限元分析 [260],[344]，以及线性代数问题的一些应用中，常常会遇到一个共同的问题——二次特征值问题 (quadratic eigenvalue problem，QEP)。

二次特征值问题与标准的特征值问题尤其是广义特征值问题，既存在密切的联系，又有着明显的不同。鉴于理论、方法及应用的重要性，本节对二次特征值问题进行专门讨论与介绍。

8.11.1 二次特征值问题的描述

具有粘滞阻尼和无外力作用的结构系统，其运动方程为微分方程 [238, p.178],[397, p.299]

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{C}\dot{\boldsymbol{x}}+\boldsymbol{K}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0} \tag{8.11.1}$$

式中，$\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K}$ 分别为质量矩阵、阻尼矩阵和刚度矩阵；而向量 $\ddot{\boldsymbol{x}},\dot{\boldsymbol{x}}$ 和 $\boldsymbol{x}$ 分别为加速度、速度和位移向量。

在振动分析中，齐次线性方程 (8.11.1) 的通解形式为

$$\boldsymbol{x}=\mathrm{e}^{\lambda t}\boldsymbol{u} \tag{8.11.2}$$

式中，$\boldsymbol{u}$ 通常为复向量，而 λ 为特征值，它一般也是复数。将式 (8.11.2) 及其关于时间的导数代入式 (8.11.1)，便得到特征方程

$$(\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0}$$

由于某些矩阵是非对称的，上式左边的解也存在形如

$$\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}(\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})=\boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}$$

的解。显然，以上两个方程是关于特征值的二次方程，简称二次特征值问题。

抽去物理涵义，可以将二次特征值问题叙述为 [271]：求标量 λ 和非零向量 $\boldsymbol{u},\boldsymbol{v}$ 满足方程

$$(\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0},\qquad \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}(\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})=\boldsymbol{0}^{\mathrm{T}} \tag{8.11.3}$$

式中，$\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K}$ 为 $n\times n$ 复矩阵。满足上述方程的标量 λ 称为特征值，非零向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 分别称为与特征值 λ 对应的右和左特征向量。特征值和特征向量组成二次特征值问题的特征对。

与标准的特征值问题 $\boldsymbol{A}_{n\times n}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}$ 和广义特征值问题 $\boldsymbol{A}_{n\times n}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{B}_{n\times n}\boldsymbol{u}$ 不同，二次特征值问题存在 $2n$ 个特征值 (有限大或者无穷大)，$2n$ 个右特征向量以及 $2n$ 个左特征向量。在工程应用中，特征值通常为复数，其实部为谐振频率，虚部表示指数阻尼，并且希望得到在频率范围内所有的特征值。一般情况下，特征对有几十个到几百个之多。

二次特征值问题是非线性特征值问题的一个重要子类。令

$$\boldsymbol{Q}(\lambda)=\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K} \tag{8.11.4}$$

这是一个二次 $n\times n$ 矩阵多项式。换言之，矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的系数是 λ 的二次多项式。通常称 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 为 λ 矩阵 [269]。于是，特征值 λ 是特征方程

$$\det\boldsymbol{Q}(z)=\det(z^2\boldsymbol{M}+z\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})=0 \tag{8.11.5}$$

的根，并称 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 为特征多项式。

定义 8.11.1[444] 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 称为正则 λ 矩阵，若特征多项式 $\det\boldsymbol{Q}(z)$ 对所有 z 值不恒等于零。反之，若 $\det\boldsymbol{Q}(z)\equiv 0,\ \forall\, z$，则称矩阵 $\boldsymbol{Q}(z)$ 是非正则 λ 矩阵。

在非正则矩阵的情况下，存在无穷多个特征值，因此这种矩阵不在考虑之列。下面假定矩阵 $\boldsymbol{Q}(z)$ 为正则矩阵，或等价假定 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 为正则矩阵。对于一个正则的 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$，两个不同的特征值可能有同一个特征向量。下面是一个有趣的例子。

例 8.11.1 [444] 假定 3×3 矩阵

$$\boldsymbol{M}=\begin{bmatrix}0&6&0\\0&6&0\\0&0&1\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}1&-6&0\\2&-7&0\\0&0&0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{K}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}$$

因此，λ 矩阵为

$$\boldsymbol{Q}(\lambda)=\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K}=\begin{bmatrix}\lambda+1&6\lambda^2-6\lambda&0\\2\lambda&6\lambda^2-7\lambda+1&0\\0&0&\lambda^2+1\end{bmatrix}$$

它是正则矩阵，因为

$$\det\boldsymbol{Q}(\lambda)=-6\lambda^5+11\lambda^4-12\lambda^3+12\lambda^2-6\lambda+1\not\equiv 0$$

由此求得 6 个特征对 $(\lambda_i,\boldsymbol{u}_i)$，$i=1,2,\cdots,6$，如下所示：

i	1	2	3	4	5	6
λ_i	1/3	1/2	1	j	−j	∞
$\boldsymbol{u}_i$	$\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$

其中，5 个特征值有限大，它们是特征多项式 $\det\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的根；另一个特征值无穷大。可以看出，特征值 $\lambda_1=1/3$ 和 $\lambda_2=1/2$ 对应的特征向量相同，而 $\lambda_4=\mathrm{j}$ 和 $\lambda_5=-\mathrm{j}$ 对应的

特征向量也相同。因此，共有 4 个不同的特征向量，它们是

$$\begin{bmatrix}1\\1\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$$

显然，第 1，2，4 个特征向量线性相关。除去其中一个线性相关的特征向量 (如第 1 个)，即得 3 个线性无关的特征向量为

$$\begin{bmatrix}0\\1\\0\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}0\\0\\1\end{bmatrix},\quad \begin{bmatrix}1\\0\\0\end{bmatrix}$$

根据矩阵 $\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K}$ 的性质不同，二次特征值问题的特征值与特征向量的性质也有所不同，详见下表的汇总。

表 8.11.1 二次特征值问题的特征值与特征向量的性质[444]

编号	矩阵性质	特征值性质	特征向量性质
1	$\boldsymbol{M}$ 非奇异	$2n$ 个有限大特征值	
2	$\boldsymbol{M}$ 奇异	有限大和无穷大特征值	
3	$\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K}$ 为实矩阵	实或共轭成对 (λ,λ^*)	若 $\boldsymbol{u}$ 是 λ 的右特征向量，则 $\boldsymbol{u}^*$ 是 λ^* 的右特征向量
4	$\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K}$ 为 Hermitian 矩阵	实或共轭成对 (λ,λ^*)	若 $\boldsymbol{u}$ 是 λ 的右特征向量，则 $\boldsymbol{u}^*$ 是 λ^* 的右特征向量
5	$\boldsymbol{M}$: Hermitian 正定 $\boldsymbol{C},\boldsymbol{K}$: Hermitian 半正定	$\mathrm{Re}(\lambda)\leqslant 0$	
6	$\boldsymbol{M},\boldsymbol{C}$对称正定 $\boldsymbol{K}$对称半正定 $\gamma(\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K})>0$	λ 取正和负，n 个大特征值与 n 个小特征值	与 n 个大特征值 (或 n 个小特征值) 对应的 n 个特征向量线性无关
7	$\boldsymbol{M},\boldsymbol{K}$: Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{M}$正定，$\boldsymbol{C}=-\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}$	特征值为纯虚数 或共轭成对(λ,λ^*)	若 $\boldsymbol{u}$ 是 λ 的右特征向量，则 $\boldsymbol{u}$ 是 $-\lambda^*$ 的左特征向量
8	$\boldsymbol{M},\boldsymbol{K}$实对称正定 $\boldsymbol{C}=-\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}$	特征值为纯虚数	

注：$\gamma(\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K})=\min\left\{\left(\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{u}\right)^2-4\left(\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{u}\right)\left(\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{u}\right):\|\boldsymbol{u}\|_2=1\right\}$

需要指出，根据二次型函数的大小，二次特征值问题又可进一步分类如下 [201]：

(1) 二次型函数满足 $(\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{u})^2<4(\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{u})(\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{u})$ 的二次特征值问题式 (8.11.1) 称为椭圆二次特征值问题 (elliptic QEP)。

(2) 二次型函数满足 $(\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{u})^2>4(\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{u})(\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{u})$ 的二次特征值问题式 (8.11.1) 称为双曲线二次特征值问题 (hyperbolic QEP)。

8.11.2 二次特征值问题求解

到目前为止，求解二次特征值问题有以下两种主要方法：

(1) 基于广义 Bezout 定理，将二次特征值问题分解为两个一次特征值子问题，简称其为分解法。

(2) 通过线性化手段，将非线性的二次特征值问题变为线性广义特征值问题，简称其为线性化方法。

下面分别介绍这两种方法。

1. 分解法

定义矩阵

$$Q(S) = MS^2 + CS + K, \quad S \in C^{n\times n} \tag{8.11.6}$$

则它与 $Q(\lambda)$ 之差为

$$\begin{aligned} Q(\lambda) - Q(S) &= M(\lambda^2 I - S^2) + C(\lambda I - S) \\ &= (\lambda M + MS + C)(\lambda I - S) \end{aligned} \tag{8.11.7}$$

这一结果称为二次矩阵多项式的广义 Bezout 定理 [167]。

如果二次矩阵方程

$$Q(S) = MS^2 + CS + K = O \tag{8.11.8}$$

存在一个解 $S \in C^{n\times n}$，则称这一解为二次矩阵方程的 (右) 解 (right solvent)。类似地，方程 $S^2M + SC + K = O$ 的解称为二次矩阵方程的左解 (left solvent)[444]。显然，若 S 是二次矩阵方程 $Q(S) = O$ 的解，则广义 Bezout 定理的公式 (8.11.7) 简化为

$$Q(\lambda) = (\lambda M + MS + C)(\lambda I - S) \tag{8.11.9}$$

式 (8.11.9) 表明，若 S 是二次矩阵方程 (8.11.8) 的解，则二次特征值问题 $\det Q(\lambda) = \det(\lambda^2 M + \lambda C + K) = 0$ 等价为 $\det Q(\lambda) = \det((\lambda M + MS + C)(\lambda I - S)) = 0$。由矩阵乘积的行列式性质 $\det(AB) = \det(A)\det(B)$ 知，二次特征值问题变成了以下两个 (一次) 特征值子问题：

(1) 二次特征值是特征方程 $\det(\lambda M + MS + C) = 0$ 的解，共得到 n 个解；

(2) 二次特征值是特征方程 $\det(\lambda I - S) = 0$ 的 n 个解。

有趣的是，特征值问题 $\det(\lambda M + MS + C) = 0$ 与广义特征值问题 $(MS + C)u = \lambda(-M)u$ 等价。

总结以上讨论知，从广义 Bezout 定理出发，二次特征值问题 $(\lambda^2 M + \lambda C + K)u = 0$ 可以分解为两个一次特征值问题：

(1) 矩阵束 $(MS + C, -M)$ 的广义特征值问题，即 $(MS + C)u = -\lambda Mu$；

(2) 矩阵 S 的标准特征值问题 $Su = \lambda u$。

也就是说，二次特征值问题的 $2n$ 个特征对 (λ_i, u_i) 由广义特征值问题 $(MS + C)u = -\lambda Mu$ 的 n 个广义特征对以及二次矩阵方程式 (8.11.8) 的解矩阵 S 的 n 个特征对共同组成。

2. 线性化方法

求解非线性方程的常用思路之一是将非线性方程线性化，变为线性方程后再求解。这一思想同样适用于二次特征值问题的求解，因为二次特征值问题本身就是非线性特征问题的一个重要子类。在线性化的过程中，当然希望线性化前后的 λ 矩阵是等价的。

定义 8.11.2[444] 称两个具有相同维数的 λ 矩阵 $\boldsymbol{P}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 为等价 λ 矩阵，若存在另外两个行列式为非零常数的 λ 矩阵 $\boldsymbol{E}(\lambda)$ 和 $\boldsymbol{F}(\lambda)$，使得

$$\boldsymbol{P}(\lambda)=\boldsymbol{E}(\lambda)\boldsymbol{Q}(\lambda)\boldsymbol{F}(\lambda) \tag{8.11.10}$$

若 $\boldsymbol{E}(\lambda)$ 和 $\boldsymbol{F}(\lambda)$ 与 λ 无关，则称 λ 矩阵 $\boldsymbol{P}(\lambda)$ 与 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 为严格等价 (strictly equivalent) λ 矩阵。

由式 (8.11.10) 知行列式 $|\boldsymbol{P}(\lambda)|=|\boldsymbol{E}(\lambda)||\boldsymbol{Q}(\lambda)||\boldsymbol{F}(\lambda)|$。由于 $|\boldsymbol{E}(\lambda)|\neq 0$ 和 $|\boldsymbol{F}(\lambda)|\neq 0$，立即得重要的结果：

$$|\boldsymbol{P}(\lambda)|=0 \;\Leftrightarrow\; |\boldsymbol{Q}(\lambda)|=0 \tag{8.11.11}$$

有必要指出，给定一个 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$，可能存在很多与 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 等价的 λ 矩阵，它们组成 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的等价 λ 矩阵类。由等价 λ 矩阵的定义知，若 $\boldsymbol{P}(\lambda)$ 和 $\boldsymbol{W}(\lambda)$ 是与 λ 矩阵 $\boldsymbol{P}(\lambda)$ 等价的任意两个 λ 矩阵，则 $\boldsymbol{P}(\lambda)$ 也是 $\boldsymbol{W}(\lambda)$ 的等价 λ 矩阵，反之亦然。换言之，与 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 等价的 λ 矩阵类彼此等价。

由于所有与 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 等价的 λ 矩阵都服从式 (8.11.11)，故在特征方程具有完全相同的根 (即特征值) 的意义上，称 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 及其所有等价 λ 矩阵具有 (相对于二次特征值的) 不变性 (invariant)。很自然地，在等价 λ 矩阵类中，我们会对其中有可能最简单的那个等价 λ 矩阵产生兴趣。这样一种可能最简单的等价 λ 矩阵称为 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的典范 (或标准) λ 矩阵。

下面的定理称为 Smith 定理，它给出了 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的典范 λ 矩阵。

定理 8.11.1 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 与一对角矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 等价，即

$$\boldsymbol{Q}(\lambda)=\boldsymbol{E}(\lambda)\boldsymbol{A}(\lambda)\boldsymbol{F}(\lambda) \tag{8.11.12}$$

式中，$\boldsymbol{A}=\mathrm{diag}\,(e_1(\lambda),e_2(\lambda),\cdots,e_n(\lambda))$，并且 $e_i(\lambda)$ 为 λ 的最小多项式 (monic polynomial)，即 $e_{i+1}(\lambda)$ 能够被 $e_i(\lambda)$ 整除。

证明 见文献 [167]，[177]，[478, pp.19~20]。

对角矩阵 $\boldsymbol{A}(\lambda)$ 称为 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的 Smith 型矩阵或典范 λ 矩阵。虽然 $\boldsymbol{E}(\lambda)$ 和 $\boldsymbol{F}(\lambda)$ 不是唯一的，但典范 λ 矩阵是唯一确定的。

业已证明 [269, Sec.3.3]，当 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 具有 $2n$ 个不同的特征值时，分解式 (8.11.12) 中的最小多项式由 $e_i(\lambda)=1,2,\cdots,n-1$ 和 $e_n(\lambda)=\prod_{i=1}^{2n}(\lambda-\lambda_i)$ 给出。

$n\times n$ 维 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的线性化变换就是求与 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 等价的 $2n\times 2n$ 线性 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B}$。

定义 8.11.3[177] 称 $2n\times 2n$ 线性 λ 矩阵 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B}$ 是 $n\times n$ 维 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的线性化，若

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}(\lambda) & \boldsymbol{O}_n\\ \boldsymbol{O}_n & \boldsymbol{I}_n\end{bmatrix}=\boldsymbol{E}(\lambda)(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})\boldsymbol{F}(\lambda) \tag{8.11.13}$$

式中，$\boldsymbol{E}(\lambda)$ 和 $\boldsymbol{F}(\lambda)$ 是 $2n\times 2n$ 维 λ 矩阵，并且它们的行列式为非零常数。

需要注意的是，λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的线性化 $\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B}$ 不是唯一的。在选择 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的线性化时，有一个原则需要遵循：尽可能保持 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的对称性或其他特殊结构。

作为最常见的线性化，下面推导与二次特征值问题等价的广义特征值问题。

容易验证，若令 $\dot{\boldsymbol{u}}=\lambda\boldsymbol{u}$，则二次特征值问题 $(\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0}$ 可以等价写作常见的状态空间方程形式：

$$L1:\quad \begin{bmatrix}\boldsymbol{C} & \boldsymbol{K}\\ -\boldsymbol{N} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dot{\boldsymbol{u}}\\ \boldsymbol{u}\end{bmatrix}+\lambda\begin{bmatrix}\boldsymbol{M} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{N}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dot{\boldsymbol{u}}\\ \boldsymbol{u}\end{bmatrix}=\boldsymbol{0} \tag{8.11.14}$$

或者

$$L2:\quad \begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & \boldsymbol{K}\\ -\boldsymbol{N} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dot{\boldsymbol{u}}\\ \boldsymbol{u}\end{bmatrix}+\lambda\begin{bmatrix}\boldsymbol{M} & \boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{N}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\dot{\boldsymbol{u}}\\ \boldsymbol{u}\end{bmatrix}=\boldsymbol{0} \tag{8.11.15}$$

式中，$\boldsymbol{N}$ 可以是任意 $n\times n$ 非奇异矩阵。

因此，若设 n 维二次特征值问题 $(\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})\boldsymbol{u}=\boldsymbol{0}$ 的线性化 $2n$ 维广义特征值问题为 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{\phi}=\lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{\phi}$，则称矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 是二次特征值问题的友矩阵对 (companion matrix pair)。相对于以上两种线性化类型，友矩阵对 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的选择如下[444],[260]：

(1) 第 1 友型 (first companion form)

$$L1:\quad \boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}-\boldsymbol{C} & -\boldsymbol{K}\\ \boldsymbol{N} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{M} & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{N}\end{bmatrix} \tag{8.11.16}$$

(2) 第 2 友型 (second companion form)

$$L2:\quad \boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} & -\boldsymbol{K}\\ \boldsymbol{N} & \boldsymbol{O}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{M} & \boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{N}\end{bmatrix} \tag{8.11.17}$$

非奇异矩阵 $\boldsymbol{N}$ 最简单的选择是单位矩阵，即 $\boldsymbol{N}=\boldsymbol{I}_n$。此时，称线性化为典型变换 (canonical transformation)。在对 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 线性化之后，即可通过矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值分解，获得二次特征值问题的解。

如 8.8 节所述，为了保证矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值分解是唯一确定的，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 必须是非奇异矩阵。由式 (8.11.16) 和式 (8.11.17) 知，这相当于要求矩阵 $\boldsymbol{M}$ 非奇异。

算法 8.11.1 (矩阵 $\boldsymbol{M}$ 非奇异时求解二次特征值问题的线性化算法)[444]

输入　λ 矩阵 $\boldsymbol{P}(\lambda)=\lambda^2\boldsymbol{M}+\lambda\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K}$

步骤 1　利用线性化公式 (8.11.16) 或者式 (8.11.17) 构造矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$。

步骤 2　使用 QZ 分解计算广义 Schur 分解：

$$\boldsymbol{T}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Z},\qquad \boldsymbol{S}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{Z} \tag{8.11.18}$$

式中，$\boldsymbol{T}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 为上三角矩阵 (对角元素分别为 t_{kk} 和 s_{kk})，而 $\boldsymbol{Q}$ 和 $\boldsymbol{Z}$ 为酉矩阵。

步骤 3　计算二次特征值及其对应的特征向量：

for $k = 1 : 2n$

$\lambda_k = t_{kk}/s_{kk}$

求解 $(\boldsymbol{T} - \lambda_k \boldsymbol{S})\boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{0}$，并令 $\boldsymbol{\xi} = \boldsymbol{Z}\boldsymbol{\phi}$

$\boldsymbol{\xi}_1 = \boldsymbol{\xi}(1:n)$; $\boldsymbol{\xi}_2 = \boldsymbol{\xi}(n+1:2n)$

$\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{P}(\lambda_k)\boldsymbol{\xi}_1/\|\boldsymbol{\xi}_1\|$; $\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{P}(\lambda_2)\boldsymbol{\xi}_2/\|\boldsymbol{\xi}_2\|$

$$\boldsymbol{u}_k = \begin{cases} \boldsymbol{\xi}(1:n), & 若\ \|\boldsymbol{r}_1\| \leqslant \|\boldsymbol{r}_2\| \\ \boldsymbol{\xi}(n+1:2n), & 其他 \end{cases}$$

endfor

步骤 2 的 QZ 分解可以直接使用 MATLAB 程序的 qz 函数运行。顺便指出，当上三角矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的某个对角元素 $s_{ii} = 0$ 时，则特征值 $\lambda = \infty$。

如果矩阵 $\boldsymbol{M}, \boldsymbol{C}$ 和 $\boldsymbol{K}$ 均为对称矩阵，并且 $\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{B}$ 是 $\boldsymbol{P}(\lambda) = \lambda^2\boldsymbol{M} + \lambda\boldsymbol{C} + \boldsymbol{K}$ 的对称线性化时，算法 8.11.1 将不能保证 $\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{B}$ 的对称性，这是因为步骤 2 采用的 QZ 分解不能保证 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的对称性。在这种情况下，需要改用以下方法 [444]：

(1) 若 $\boldsymbol{B}$ 为确定的矩阵，则先计算 $\boldsymbol{B}$ 的 Cholesky 分解 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$，其中，$\boldsymbol{L}$ 为下三角矩阵。

(2) 将 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}$ 代入对称的广义特征值问题 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{\xi} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{\xi}$，变成对称的标准特征值问题 $\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{L}^{-\mathrm{T}}\boldsymbol{\phi} = \lambda\boldsymbol{\phi}$，其中，$\boldsymbol{\phi} = \boldsymbol{L}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\xi}$。

(3) 利用对称 QR 分解，计算对称矩阵 $\boldsymbol{L}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{L}^{-\mathrm{T}}$ 的特征对 $(\lambda, \boldsymbol{\phi})$。这些特征对即是二次特征值问题待求的特征对。

文献 [308] 介绍了线性化后二次特征值分解的广义 Davidson 算法、修正 Davidson 算法、二次残差迭代法等几种方法。

算法 8.11.1 只适用于矩阵 $\boldsymbol{M}$ 非奇异的情况。然而，在一些工业应用中，矩阵 $\boldsymbol{M}$ 往往是奇异矩阵。例如，在阻尼结构的有限元分析中，经常遇到所谓的无质量自由度 (massless degree of freedom)，它们对应为质量矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的某些列为零向量 [260]。

当矩阵 $\boldsymbol{M}$ 奇异，从而使 $\boldsymbol{B}$ 也奇异时，有两种方法可以改进原二次特征值问题 [260]。

一种方法使用谱变换 (spectral transformation)，即引入一个适当的特征值位移量 λ_0，变为

$$\mu = \lambda - \lambda_0 \tag{8.11.19}$$

于是，典型的 I 型线性化变为

$$\begin{bmatrix} -\boldsymbol{C} - \lambda_0\boldsymbol{M} & -\boldsymbol{K} \\ \boldsymbol{I} & -\lambda_0\boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{u}} \\ \boldsymbol{u} \end{bmatrix} = \mu \begin{bmatrix} \boldsymbol{M} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{u}} \\ \boldsymbol{u} \end{bmatrix} \tag{8.11.20}$$

注意，位移 λ_0 的适当选择可以保证矩阵 $\begin{bmatrix} -\boldsymbol{C} - \lambda_0\boldsymbol{M} & -\boldsymbol{K} \\ \boldsymbol{I} & -\lambda_0\boldsymbol{I} \end{bmatrix}$ 非奇异。

另一改进是令

$$\Lambda = \frac{1}{\mu} \tag{8.11.21}$$

将 $\mu = 1/\Lambda$ 代入式 (8.11.20)，并予以重排，即得

$$\begin{bmatrix} -\boldsymbol{C}-\lambda_0\boldsymbol{M} & -\boldsymbol{K} \\ \boldsymbol{I} & -\lambda_0\boldsymbol{I} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{M} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{u}} \\ \boldsymbol{u} \end{bmatrix} = \Lambda \begin{bmatrix} \dot{\boldsymbol{u}} \\ \boldsymbol{u} \end{bmatrix} \tag{8.11.22}$$

上式是标准的特征值分解

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \Lambda\boldsymbol{x} \tag{8.11.23}$$

式中

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -\boldsymbol{C}-\lambda_0\boldsymbol{M} & -\boldsymbol{K} \\ \boldsymbol{I} & -\lambda_0\boldsymbol{I} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} \boldsymbol{M} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \tag{8.11.24}$$

因此，求解特征值问题 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \Lambda\boldsymbol{x}$，即可得到特征值 Λ 和与之对应的特征向量。然后，又可由

$$\lambda = \mu + \lambda_0 = \frac{1}{\Lambda} + \lambda_0 \tag{8.11.25}$$

确定二次特征值问题的特征值。

有必要指出，任何一个高次特征值问题

$$(\lambda^m \boldsymbol{A}_m + \lambda^{m-1}\boldsymbol{A}_{m-1} + \cdots + \lambda\boldsymbol{A}_1 + \boldsymbol{A}_0)\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \tag{8.11.26}$$

都可以线性化，例如 [308]

$$\begin{bmatrix} -\boldsymbol{A}_0 & & & \\ & \boldsymbol{I} & & \\ & & \ddots & \\ & & & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{u} \\ \lambda\boldsymbol{u} \\ \vdots \\ \lambda^{m-1}\boldsymbol{u} \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \boldsymbol{A}_1 & \boldsymbol{A}_2 & \cdots & \boldsymbol{A}_m \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} & \cdots & \boldsymbol{O} \\ \vdots & & \ddots & \vdots \\ \boldsymbol{O} & \cdots & \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{u} \\ \lambda\boldsymbol{u} \\ \vdots \\ \lambda^{m-1}\boldsymbol{u} \end{bmatrix} \tag{8.11.27}$$

就是说，m 次特征值问题也可以线性化为标准的广义特征值问题 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{B}\boldsymbol{x}$ 求解。

8.11.3 λ 矩阵的逆矩阵

容易求出满足线性化定义式 (8.11.13) 的矩阵 $\boldsymbol{E}(\lambda)$ 和 $\boldsymbol{F}(\lambda)$ 分别为

$$L1: \quad \boldsymbol{E}(\lambda) = \begin{bmatrix} -(\boldsymbol{C}+\lambda\boldsymbol{M})\boldsymbol{N}^{-1} & -\boldsymbol{I} \\ \boldsymbol{N}^{-1} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{F}(\lambda) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \lambda\boldsymbol{I} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \tag{8.11.28}$$

$$L2: \quad \boldsymbol{E}(\lambda) = \begin{bmatrix} -\boldsymbol{I} & -\lambda\boldsymbol{M}\boldsymbol{N}^{-1} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{N}^{-1} \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{F}(\lambda) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \lambda\boldsymbol{I} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} \tag{8.11.29}$$

假定 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 非奇异，则由式 (8.11.13) 知

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}(\lambda) & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix}^{-1} = \boldsymbol{F}^{-1}(\lambda)(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{E}^{-1}(\lambda)$$

或

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}^{-1}(\lambda) & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{I} \end{bmatrix} = \boldsymbol{F}^{-1}(\lambda)(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{E}^{-1}(\lambda)$$

于是有

$$
\begin{aligned}
Q^{-1}(\lambda) &= [I, O]\begin{bmatrix} Q(\lambda) & O \\ O & I \end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix} I \\ O \end{bmatrix} \\
&= [I, O]\, F^{-1}(\lambda)(A - \lambda B)^{-1} E^{-1}(\lambda)\begin{bmatrix} I \\ O \end{bmatrix}
\end{aligned}
\tag{8.11.30}
$$

回顾分块三角矩阵的求逆公式知：若对角线或者交叉对角线上的非零矩阵为非奇异矩阵，则

$$
\begin{bmatrix} X & O \\ Y & Z \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} X^{-1} & O \\ -Z^{-1}YX^{-1} & Z^{-1} \end{bmatrix} \tag{8.11.31}
$$

$$
\begin{bmatrix} X & Y \\ Z & O \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} O & Z^{-1} \\ Y^{-1} & -Y^{-1}XZ^{-1} \end{bmatrix} \tag{8.11.32}
$$

$$
\begin{bmatrix} X & Y \\ O & Z \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} X^{-1} & -X^{-1}YZ^{-1} \\ O & Z^{-1} \end{bmatrix} \tag{8.11.33}
$$

将式 (8.11.28) 代入式 (8.11.30)，并利用分块三角矩阵的求逆公式 (8.11.31) 和式 (8.11.32)，即可得到线性化 $L1$ 情况下 λ 矩阵 $Q(\lambda)$ 的逆矩阵 $Q^{-1}(\lambda)$ 为

$$
\begin{aligned}
L1:\quad Q^{-1}(\lambda) &= [I, O]\begin{bmatrix} I & O \\ \lambda I & I \end{bmatrix}^{-1}(A - \lambda B)^{-1}\begin{bmatrix} -(C + \lambda M)N^{-1} & -I \\ N^{-1} & O \end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix} I \\ O \end{bmatrix} \\
&= [I, O]\,(A - \lambda B)^{-1}\begin{bmatrix} O \\ -I \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

类似地，将式 (8.11.29) 代入式 (8.11.30)，并利用分块矩阵的求逆公式 (8.11.31) 和式 (8.11.33)，则线性化 $L2$ 情况下 λ 矩阵 $Q(\lambda)$ 的逆矩阵 $Q^{-1}(\lambda)$ 为

$$
\begin{aligned}
L2:\quad Q^{-1}(\lambda) &= [I, O]\begin{bmatrix} I & O \\ \lambda I & I \end{bmatrix}^{-1}(A - \lambda B)^{-1}\begin{bmatrix} -I & -\lambda MN^{-1} \\ O & N^{-1} \end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix} I \\ O \end{bmatrix} \\
&= [I, O]\,(A - \lambda B)^{-1}\begin{bmatrix} -I \\ O \end{bmatrix}
\end{aligned}
$$

整理后，为

$$
L1:\quad Q^{-1}(\lambda) = [I, O]\,(A - \lambda B)^{-1}\begin{bmatrix} O \\ -I \end{bmatrix} \tag{8.11.34}
$$

$$
L2:\quad Q^{-1}(\lambda) = [I, O]\,(A - \lambda B)^{-1}\begin{bmatrix} -I \\ O \end{bmatrix} \tag{8.11.35}
$$

由于线性化后，二次特征值问题 $Q(\lambda) = \lambda^2 M_{n\times n} + \lambda C_{n\times n} + K_{n\times n}$ 转化为矩阵束 $(A_{2n\times 2n}, B_{2n\times 2n})$ 的广义特征值问题，所以二次特征值问题

$$
Q(\lambda_i)u_i = 0, \qquad v_i^{\mathrm{H}} Q(\lambda_i) = 0^{\mathrm{T}}
$$

分别与 $(A - \lambda_i B)\phi_i = 0$，$\psi_i^{\mathrm{H}}(A - \lambda_i B) = 0^{\mathrm{T}}$ 等价，其中

$$
\phi_i = \begin{bmatrix} u_i \\ \lambda_i u_i \end{bmatrix}, \qquad \psi_i = \begin{bmatrix} v_i \\ \lambda_i^* v_i \end{bmatrix} \tag{8.11.36}
$$

令 $\boldsymbol{\Lambda}=\text{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_{2n})$ 为 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的特征值矩阵，且 $\boldsymbol{U}_{n\times 2n}=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_{2n}]$ 和 $\boldsymbol{V}_{n\times 2n}=[\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_{2n}]$ 分别是 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的右和左特征向量矩阵，则式 (8.11.36) 可以写作

$$\boldsymbol{\Phi}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}\\ \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{\Psi}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}\\ \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^*\end{bmatrix}\tag{8.11.37}$$

它们都是矩阵束 $\boldsymbol{A}_{2n\times 2n}-\lambda\boldsymbol{B}_{2n\times 2n}$ 的 $2n\times 2n$ 右和左特征向量矩阵。如果对 $\boldsymbol{\Phi}$ 和 $\boldsymbol{\Psi}$ 归一化，使得

$$\boldsymbol{\Psi}^{\text{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Lambda},\qquad \boldsymbol{\Psi}^{\text{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{I}\tag{8.11.38}$$

假定 λ 不是矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值，或者等价不是 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的特征值，则式 (8.11.38) 给出结果

$$\boldsymbol{\Psi}^{\text{H}}(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Lambda}-\lambda\boldsymbol{I}$$

两边求逆矩阵，得

$$\boldsymbol{\Phi}^{-1}(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})^{-1}(\boldsymbol{\Psi}^{\text{H}})^{-1}=(\boldsymbol{\Lambda}-\lambda\boldsymbol{I})^{-1}$$

即有

$$(\boldsymbol{A}-\lambda\boldsymbol{B})^{-1}=\boldsymbol{\Phi}(\boldsymbol{\Lambda}-\lambda\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{\Psi}^{\text{H}}\tag{8.11.39}$$

将这一结果连同式 (8.11.37) 一起分别代入式 (8.11.34) 和式 (8.11.35)，即得

$$L1:\quad \boldsymbol{Q}^{-1}(\lambda)=[\boldsymbol{I},\boldsymbol{O}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}\\ \lambda\boldsymbol{U}\end{bmatrix}(\boldsymbol{\Lambda}-\lambda\boldsymbol{I})\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}\\ \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^*\end{bmatrix}^{\text{H}}\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}\\ -\boldsymbol{I}\end{bmatrix}$$

$$L2:\quad \boldsymbol{Q}^{-1}(\lambda)=[\boldsymbol{I},\boldsymbol{O}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}\\ \lambda\boldsymbol{U}\end{bmatrix}(\boldsymbol{\Lambda}-\lambda\boldsymbol{I})\begin{bmatrix}\boldsymbol{V}\\ \boldsymbol{V}\boldsymbol{\Lambda}^*\end{bmatrix}^{\text{H}}\begin{bmatrix}-\boldsymbol{I}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$$

整理后，为

$$L1:\quad \boldsymbol{Q}^{-1}(\lambda)=\boldsymbol{U}(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\Lambda})^{-1}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\text{H}}=\sum_{i=1}^{2n}\frac{\lambda_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\text{H}}}{\lambda-\lambda_i}\tag{8.11.40}$$

$$L2:\quad \boldsymbol{Q}^{-1}(\lambda)=\boldsymbol{U}(\lambda\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\Lambda})^{-1}\boldsymbol{V}^{\text{H}}=\sum_{i=1}^{2n}\frac{\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\text{H}}}{\lambda-\lambda_i}\tag{8.11.41}$$

需要注意的是，λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的扰动有可能破坏其正定性，使得逆矩阵 $\boldsymbol{Q}^{-1}(\lambda)$ 的计算变得不稳定。下面的定理刻画了 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的正定性。

定理 8.11.2 具有正定矩阵 $\boldsymbol{M}$ 的二次特征值问题式 (8.11.1) 是椭圆二次特征值问题，当且仅当 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 对所有实特征值 $\lambda\in R$ 正定。式 (8.11.1) 是双曲线二次特征值问题，当且仅当 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 对所有实特征值 $\lambda\in R$ 负定。

证明 [201] 令 $\boldsymbol{x}$ 是任意一个非零向量，则 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的二次型

$$\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{Q}(\lambda)\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{x})\lambda^2+(\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{x})\lambda+(\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{x})$$

由于 $\boldsymbol{M}$ 正定，所以 $\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{x}>0$。于是，当 λ 为实数时，上式大于零的充分必要条件是 $(\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{x})^2-4(\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{M}\boldsymbol{x})(\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{K}\boldsymbol{x})$ 对于所有非零向量 $\boldsymbol{x}$ 是严格小于零的。因此，λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$

对所有实特征值 λ 都是正定的，当且仅当二次特征值问题式 (8.11.1) 是椭圆二次特征值问题。类似地，可以证明式 (8.11.1) 是双曲线二次特征值问题，当且仅当 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 对所有实特征值 $\lambda \in R$ 负定。 ■

当矩阵 $\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K}$ 存在扰动时，λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 随之被扰动，使得原本正定的 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 失去正定性。有关 λ 矩阵 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 的扰动分析，请参考文献 [201]，这里不再赘述。

8.11.4 应用举例 1：AR 参数估计

在语音的线性预测编码 [375]、生物医学信号处理 [100]、时间序列预报与控制 [55] 和谱估计 [524] 等中，常常需要将实随机过程建模成自回归 (AR) 过程

$$x(n)+a(1)x(n-1)+\cdots+a(p)x(n-p)=e(n) \tag{8.11.42}$$

式中，$a(1),a(2),\cdots,a(p)$ 为 AR 参数，p 为 AR 阶数，$e(n)$ 为不可观测的激励信号，通常为白噪声，其方差为 σ_e^2。

用 $x(n-\tau),\tau\geqslant 1$ 同乘上式两边，并取数学期望，得线性法方程

$$R_x(\tau)+a(1)R_x(\tau-1)+\cdots+a(p)R_x(\tau-p)=0,\quad \tau=1,2,\cdots \tag{8.11.43}$$

式中，$R_x(\tau)=\mathrm{E}\{x(n)x(n-\tau)\}$ 表示 AR 过程的自相关函数。这一法方程称为 Yule-Walker 方程。

取 $\tau=1,2,\cdots,p$，则式 (8.11.43) 可以写作

$$\begin{bmatrix} R_x(0) & R_x(-1) & \cdots & R_x(-p+1) \\ R_x(1) & R_x(0) & \cdots & R_x(-p+2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R_x(p-1) & R_x(p-2) & \cdots & R_x(0) \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a(1) \\ a(2) \\ \vdots \\ a(p)\end{bmatrix}=-\begin{bmatrix} R_x(1) \\ R_x(2) \\ \vdots \\ R_x(p)\end{bmatrix} \tag{8.11.44}$$

然而，在许多情况下存在观测噪声 $v(n)$，即实际观测信号为

$$y(n)=x(n)+v(n)$$

式中，$v(n)$ 为白噪声，其方差为 σ^2，并与 $x(n)$ 统计不相关。在这一假设下，观测信号 $y(n)$ 与 AR 随机过程 $x(n)$ 的自相关函数之间存在下列关系

$$R_x(\tau)=R_y(\tau)-\sigma^2\delta(\tau)=\begin{cases} R_y(0)-\sigma^2, & \tau=0 \\ R_y(\tau), & \tau\neq 0\end{cases}$$

将这一关系代入式 (8.11.44) 后，Yule-Walker 方程变为

$$\begin{bmatrix} R_y(0)-\sigma^2 & R_y(-1) & \cdots & R_y(-p+1) \\ R_y(1) & R_y(0)-\sigma^2 & \cdots & R_y(-p+2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R_y(p-1) & R_y(p-2) & \cdots & R_y(0)-\sigma^2 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} a(1) \\ a(2) \\ \vdots \\ a(p)\end{bmatrix}=-\begin{bmatrix} R_y(1) \\ R_y(2) \\ \vdots \\ R_y(p)\end{bmatrix} \tag{8.11.45}$$

称为噪声补偿的 Yule-Walker 方程 [444]。

令 $\boldsymbol{a} = [-a(1), -a(2), \cdots, -a(p)]^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{r}_1 = [R_y(1), R_y(2), \cdots, R_y(p)]^{\mathrm{T}}$ 和

$$\boldsymbol{R}_y = \begin{bmatrix} R_y(0) & R_y(-1) & \cdots & R_y(-p+1) \\ R_y(1) & R_y(0) & \cdots & R_y(-p+2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ R_y(p-1) & R_y(p-2) & \cdots & R_y(0) \end{bmatrix}$$

则式 (8.11.45) 可改写为

$$(\boldsymbol{R}_y - \sigma^2 \boldsymbol{I}_p)\boldsymbol{a} = \boldsymbol{r}_1 \tag{8.11.46}$$

由于 $R_y(\tau) = R_x(\tau),\ \tau \geqslant 1$，故若令 $\tau = p+1, p+2, \cdots, p+q$，则由式 (8.11.43) 得

$$\left.\begin{aligned} \boldsymbol{g}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a} &= R_y(p+1) \\ \boldsymbol{g}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a} &= R_y(p+2) \\ &\cdots \\ \boldsymbol{g}_q^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a} &= R_y(p+q) \end{aligned}\right\} \tag{8.11.47}$$

式中，$\boldsymbol{g}_i = [R_y(p+i-1), R_y(p+i-2), \cdots, R_y(i)]^{\mathrm{T}}$。将式 (8.11.46) 和式 (8.11.47) 合并，即可得到矩阵方程

$$(\bar{\boldsymbol{R}}_y - \lambda \boldsymbol{D})\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}_{p+q} \tag{8.11.48}$$

式中，$\bar{\boldsymbol{R}}_y$ 和 $\boldsymbol{D}$ 均为 $(p+q)\times(p+1)$ 矩阵，且 $\boldsymbol{v}$ 是 $(p+1)\times 1$ 向量，它们定义为

$$\bar{\boldsymbol{R}}_y = \begin{bmatrix} R_y(1) & R_y(0) & R_y(-1) & \cdots & R_y(-p+1) \\ R_y(2) & R_y(1) & R_y(0) & \cdots & R_y(-p+2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ R_y(p) & R_y(p-1) & R_y(p-2) & \cdots & R_y(0) \\ R_y(p+1) & R_y(p) & R_y(2) & \cdots & R_y(1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ R_y(p+q) & R_y(p+q-1) & R_y(p+q-2) & \cdots & R_y(q) \end{bmatrix}$$

和

$$\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{v} = \begin{bmatrix} 1 \\ a(1) \\ a(2) \\ \vdots \\ a(p) \end{bmatrix}$$

用 $(\bar{\boldsymbol{R}}_y - \lambda \boldsymbol{D})^{\mathrm{T}}$ 左乘式 (8.11.48) 两边，即有

$$(\lambda^2 \boldsymbol{M} + \lambda \boldsymbol{C} + \boldsymbol{K})\boldsymbol{v} = \boldsymbol{0}_{p+1} \tag{8.11.49}$$

式中

$$M=\bar{R}_y^{\mathrm{T}}\bar{R}_y,\quad C=-(\bar{R}_y^{\mathrm{T}}D+D^{\mathrm{T}}\bar{R}_y),\quad K=D^{\mathrm{T}}D \tag{8.11.50}$$

由于矩阵 M,C 和 K 均为对称矩阵，故式 (8.11.49) 为对称二次特征值问题。

令

$$A=\begin{bmatrix}K & O\\ O & I\end{bmatrix},\qquad B=\begin{bmatrix}-C & -M\\ I & O\end{bmatrix} \tag{8.11.51}$$

则二次特征值问题变为 $2(p+1)$ 维广义特征值问题

$$(A-\lambda B)u=0 \tag{8.11.52}$$

根据表 8.11.1 中的性质 P3，特征值是实的或共轭成对 (λ,λ^*) 出现，并且与 (λ,λ^*) 对应的右特征向量也为共轭对 (u,u^*)。在 $2(p+1)$ 个特征对 (λ_i,u_i) 中，只有同时满足式 (8.11.46) 和式 (8.11.47) 的特征值 λ 及其对应的特征向量 u 才分别是待求的观测噪声方差 σ^2 和 AR 随机过程参数向量 $[1,a(1),\cdots,a(p)]^{\mathrm{T}}$ 的估计。

由被加性白噪声污染的观测数据估计 AR 随机过程参数的上述方法是 Davila 于 1998 年提出的 [110]。

8.11.5 应用举例 2：约束最小二乘

考虑下面的约束最小二乘问题

$$x=\arg\min\left\{x^{\mathrm{T}}Ax-2b^{\mathrm{T}}x\right\} \tag{8.11.53}$$

约束条件为

$$x^{\mathrm{T}}x=c^2 \tag{8.11.54}$$

其中，$A\in R^{n\times n}$ 为对称矩阵；c 为不等于 0 的实常数，在很多应用中常取 $c=1$。

这个约束最优化问题可以用 Lagrange 乘数法求解。令代价函数

$$J(x,\lambda)=x^{\mathrm{T}}Ax-2b^{\mathrm{T}}x+\lambda(c^2-x^{\mathrm{T}}x) \tag{8.11.55}$$

由 $\dfrac{\partial J(x,\lambda)}{\partial x}=0$ 和 $\dfrac{\partial J(x,\lambda)}{\partial\lambda}=0$ 分别得

$$(A-\lambda I)x=b,\qquad x^{\mathrm{T}}x=c^2 \tag{8.11.56}$$

令 $x=(A-\lambda I)y$，将这一假设代入式 (8.11.56) 的第一个式子，即得

$$(A-\lambda I)^2y=b\quad 或\quad (\lambda^2I-2\lambda A+A^2)y-b=0 \tag{8.11.57}$$

利用 $x=(A-\lambda I)y$ 及 A 为对称矩阵之假设，易知

$$\begin{aligned}x^{\mathrm{T}}x&=y^{\mathrm{T}}(A-\lambda I)^{\mathrm{T}}(A-\lambda I)y=y^{\mathrm{T}}(A-\lambda I)[(A-\lambda I)y]\\&=y^{\mathrm{T}}(A-\lambda I)x=y^{\mathrm{T}}b\end{aligned}$$

于是，式 (8.11.56) 的第二个式子可以等价写作

$$\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=c^2 \quad 或 \quad 1=\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}/c^2$$

由此得

$$\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}/c^2=\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}/c^2$$

因为 $\boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}=\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}$。将上式代入式 (8.11.57)，即有

$$\left[\lambda^2\boldsymbol{I}-2\lambda\boldsymbol{A}+\left(\boldsymbol{A}^2-c^{-2}\boldsymbol{b}\boldsymbol{b}^{\mathrm{T}}\right)\right]\boldsymbol{y}=\boldsymbol{0} \tag{8.11.58}$$

这恰好是一个对称的二次特征值问题。

Gander 等人 [165] 业已证明，约束最小二乘问题的求解需要 Lagrange 乘数 λ 的最小二乘解。

总结以上讨论，可以得出约束最小二乘问题 (8.11.53) 的求解步骤如下：

(1) 求解二次特征值问题式 (8.11.58)，得到特征值 λ_i (特征向量 $\boldsymbol{y}_i$ 可以不需要)。

(2) 确定最小的特征值 $\lambda_{\min}$。

(3) 约束最小二乘问题式 (8.11.53) 的解由 $\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{A}-\lambda_{\min}\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{b}$ 给出。

8.11.6 应用举例 3：多输入 – 多输出系统

多输入 – 多输出 (multiple input-multiple output，MIMO) 系统是信号处理、自动控制和系统工程中经常遇到的线性系统。

考虑 m 个输入和 n 个输出的线性受控系统

$$\boldsymbol{M}\ddot{\boldsymbol{q}}(t)+\boldsymbol{C}\dot{\boldsymbol{q}}(t)+\boldsymbol{K}=\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}(t) \tag{8.11.59}$$

$$\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{L}\boldsymbol{q}(t) \tag{8.11.60}$$

式中，$\boldsymbol{u}(t)\in C^m, m\leqslant r$ 为某个输入信号向量；$\boldsymbol{q}(t)\in C^r$ 为系统的状态向量；$\boldsymbol{y}(t)\in C^n$ 为系统的输出向量；$\boldsymbol{B}\in C^{r\times m}$ 为系统的输入作用矩阵；$\boldsymbol{L}\in C^{n\times r}$ 为系统的输出作用矩阵；$\boldsymbol{M},\boldsymbol{C},\boldsymbol{K}$ 为 $r\times r$ 矩阵。

取 MIMO 系统的 Laplace 变换，并假定零初始条件，得

$$s^2\boldsymbol{M}\bar{\boldsymbol{q}}(s)+s\boldsymbol{C}\bar{\boldsymbol{q}}(t)+\boldsymbol{K}\bar{\boldsymbol{q}}(s)=\boldsymbol{B}\bar{\boldsymbol{u}}(s) \tag{8.11.61}$$

$$\bar{\boldsymbol{y}}(s)=\boldsymbol{L}\bar{\boldsymbol{q}}(s) \tag{8.11.62}$$

于是，系统的传递函数矩阵 (transfer function matrix)

$$\boldsymbol{G}(s)=\frac{\bar{\boldsymbol{y}}(s)}{\bar{\boldsymbol{u}}(s)}=\boldsymbol{L}(s^2\boldsymbol{M}+s\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})^{-1}\boldsymbol{B} \tag{8.11.63}$$

令 $\boldsymbol{Q}(s)=s^2\boldsymbol{M}+s\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K}$，则由式 (8.11.40) 和式 (8.11.41)，得 $L1$ 和 $L2$ 情况下的逆矩阵

$$L1: \quad (s^2\boldsymbol{M}+s\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})^{-1}=\boldsymbol{U}(s\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\Lambda})^{-1}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}=\sum_{i=1}^{2n}\frac{\lambda_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}}{s-\lambda_i} \tag{8.11.64}$$

$$L2: \quad (s^2\boldsymbol{M}+s\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K})^{-1}=\boldsymbol{U}(s\boldsymbol{I}-\boldsymbol{\Lambda})^{-1}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}=\sum_{i=1}^{2n}\frac{\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}}{s-\lambda_i} \tag{8.11.65}$$

即是说，二次特征多项式 $s^2\boldsymbol{M}+s\boldsymbol{C}+\boldsymbol{K}$ 的特征值给出受控 MIMO 系统传递函数的极点。因此，二次特征值为研究受控 MIMO 系统的控制性能和响应性能提供了依据。

文献 [444] 介绍了二次特征值问题的诸多应用，是一篇关于二次特征值问题的精彩综述。

至此，我们介绍了特征值分解的几种推广形式：广义特征值分解、Rayleigh 商、广义 Rayleigh 商和二次特征值问题。

8.12 联合对角化

从本质上讲，一个 Hermitian 矩阵的特征值分解就是寻找一个酉矩阵，使该 Hermitian 矩阵对角化。本节从多个矩阵的同时对角化，介绍特征值分解的另一种推广：联合对角化。

8.12.1 联合对角化问题

在存在加性噪声的环境中，盲信号分离的观测信号向量 $\boldsymbol{x}$ 可以表示为

$$\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}(t)+\boldsymbol{v}(t),\quad t=1,2,\cdots \tag{8.12.1}$$

式中，$\boldsymbol{x}(t)=[x_1(t),x_2(t),\cdots,x_m(t)]^{\mathrm{T}}$, $\boldsymbol{s}(t)=[s_1(t),s_2(t),\cdots,s_n(t)]^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{v}(t)=[v_1(t), v_2(t),\cdots,v_m(t)]^{\mathrm{T}}$ 分别表示 t 时刻的观测信号向量、未知的信号源向量和加性噪声向量；而 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n}$ 是表示信号源混合状况的矩阵，称为混合矩阵，它是未知的。

盲信号分离的目的是设计一个分离矩阵 $\boldsymbol{W}$，使得其输出

$$\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{W}\boldsymbol{x}(t)=\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}(t)+\boldsymbol{W}\boldsymbol{v}(t) \tag{8.12.2}$$

是信号向量 $\boldsymbol{s}(t)$ 的拷贝。显然，理想情况下，分离矩阵应该满足 $\boldsymbol{W}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{I}$，即 $\boldsymbol{W}=\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 是混合矩阵的广义逆矩阵。然而，混合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的辨识存在固有的不确定性：一方面是因为 $\boldsymbol{A}$ 本身是未知的，另一方面是因为若令 $m\times n$ 混合矩阵 $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n]$，则式 (8.12.1) 可以等价写作

$$\boldsymbol{x}(t)=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{a}_i s_i(t)+\boldsymbol{v}(t)=\sum_{i=1}^{n}\frac{\boldsymbol{a}_i}{\alpha_i}\alpha_i s_i(t)+\boldsymbol{v}(t) \tag{8.12.3}$$

这说明，混合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量交换位置与 (或) 同列的所有元素除以同一个不为零的常数 α_i 时，观测数据向量 $\boldsymbol{x}(t)$ 相同。

由于混合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列向量排序及其元素值辨识的不确定性，所以分解矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的辨识结果不可能恰好等于混合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵，即 $\boldsymbol{WA} \neq \boldsymbol{I}$，而只能满足

$$\boldsymbol{WA} = \boldsymbol{PD} = \boldsymbol{G} \tag{8.12.4}$$

的关系，其中，$\boldsymbol{P}$ 为 $n \times n$ 置换矩阵，反映 $\boldsymbol{A}$ 的列向量排序的不确定性能；而 $\boldsymbol{D}$ 为 $n \times n$ 对角矩阵，其对角元素反映 $\boldsymbol{A}$ 的列向量元素值辨识的不确定性。矩阵 $\boldsymbol{G} = \boldsymbol{PD}$ 为广义置换矩阵。应当指出，当辨识出来的分离矩阵满足式 (8.12.4) 的关系时，并且抑制了加性白噪声 $\boldsymbol{v}(t)$ 时，输出向量

$$\boldsymbol{y}(t) = \boldsymbol{Wx}(t) + \boldsymbol{Wv}(t) = \boldsymbol{PDs}(t) + \boldsymbol{Wv}(t) \tag{8.12.5}$$

只是原信号向量的元素的不同排序和相差一个常数因子而已。从信号分离的观点看，这是完全允许的。

定义 8.12.1 [73] 两个 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{M}$ 和 $\boldsymbol{N}$ 称为本质相等矩阵，记作 $\boldsymbol{M} \doteq \boldsymbol{N}$，若 $\boldsymbol{M} = \boldsymbol{NG}$，其中，$\boldsymbol{G}$ 为 $n \times n$ 广义置换矩阵。

对于盲信号分离，通常作以下假设：

(1) $m \times n$ 混合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 列满秩，但矩阵本身未知。

(2) 源信号 $s_i(t)$ 具有零均值，空间不相关，即其相关函数 $\boldsymbol{R}_{ss}(0) = \mathrm{E}\{\boldsymbol{s}(t)\boldsymbol{s}^{\mathrm{H}}(t)\} = \boldsymbol{I}$；并且它们均为窄带信号，使得对某些 τ 值，有 $\mathrm{E}\{s_i(t)s_i^*(t-\tau)\} = \rho_i(\tau) \neq 0$，即

$$\boldsymbol{R}_s(\tau) = \mathrm{E}\{\boldsymbol{s}(t)\boldsymbol{s}^{\mathrm{H}}(t-\tau)\} = \mathrm{diag}[\rho_1(\tau), \rho_2(\tau), \cdots, \rho_n(\tau)] = \boldsymbol{D}_\tau \tag{8.12.6}$$

(3) 至多只有一个信号服从正态分布，为高斯信号。

(4) 加性噪声向量 $\boldsymbol{v}(t)$ 为零均值向量，并且是时域白色、空域有色的复随机过程，与源信号独立，即加性噪声向量的自相关矩阵

$$\boldsymbol{R}_v(\tau) = \mathrm{E}\{\boldsymbol{v}(t)\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}(t-\tau)\} = \delta(\tau)\boldsymbol{R}_v, \quad 对某些\ \tau \tag{8.12.7}$$

式中，$\delta(\tau)$ 为 Kronecker δ 函数，并且 $\boldsymbol{R}_v = \mathrm{E}\{\boldsymbol{v}(t)\boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}(t)\}$。

在上述假设下，阵列输出向量的自相关矩阵为

$$\boldsymbol{R}_x(0) = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\} = \boldsymbol{AD}_0\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{R}_v \tag{8.12.8}$$

$$\boldsymbol{R}_x(\tau_i) = \mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t-\tau_i)\} = \boldsymbol{AD}_{\tau_i}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}, \quad \tau_i \neq 0 \tag{8.12.9}$$

盲信号分离的主要目的就是在没有关于阵列流形知识的情况下，辨识未知的混合矩阵 $\boldsymbol{A}$。从以上两式可以看出，为了抑制噪声的影响，应该使用对某些 $\tau \neq 0$ (例如 $\tau = 1, 2, \cdots, p$) 的式 (8.12.9) 辨识 $\boldsymbol{A}$。

从数学的角度看问题，混合矩阵的辨识问题又可以表述为：给定 p 个矩阵 $\boldsymbol{R}_x(\tau_i)$, $i=1,2,\cdots,p$，求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{D}_{\tau_i}, i=1,2,\cdots,p$，使得式

$$\boldsymbol{R}_x(\tau_i)=\boldsymbol{A}\boldsymbol{D}_{\tau_i}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \tag{8.12.10}$$

这就是多个矩阵的所谓联合对角化 (joint diagonalization)，也称同时对角化 (simultaneous diagonalization)。

关于联合对角化，有下面的唯一性条件。

定理 8.12.1 (唯一性条件)[37],[446] 令 $\tau_1,\tau_2,\cdots,\tau_p$ 是 p 个时间滞后，并令 $\boldsymbol{V}$ 是一个 $m\times n$ 满列秩矩阵，满足关系式

$$\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_x(\tau_i)\boldsymbol{V}=\mathrm{diag}[d_1(k),d_2(k),\cdots,d_n(k)],\quad \forall 1\leqslant i\leqslant p \tag{8.12.11}$$

$$d_i(k)\neq d_j(k),\quad \forall 1\leqslant i\neq j\leqslant n,\qquad \exists k,\ 1\leqslant k\leqslant p \tag{8.12.12}$$

式中，$d_i(k),i=1,2,\cdots,n$ 是 $\boldsymbol{R}_x(\tau_i)$ 的特征值，则 $\boldsymbol{V}$ 是与混合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 本质相等的矩阵。

当加性噪声向量 $\boldsymbol{v}(t)$ 为高斯有色噪声向量时，需要使用高阶累积量矩阵代替自相关矩阵，以便抑制高斯有色噪声。为此，令 $\boldsymbol{C}(i,j)$ 表示累积量矩阵，其 (l,k) 元素定义为

$$c_{lk}(i,j)=\mathrm{cum}[x_i(t),x_j^*(t),x_l(t),x_k^*(t)] \tag{8.12.13}$$

式中，$x_i(t)$ 是向量 $\boldsymbol{x}(t)$ 的第 i 个元素，cum[·] 为累积量符号，而上标 $*$ 表示复数共轭运算。此时，阵列信号处理中的联合对角化问题为 [472]

$$\boldsymbol{C}(i,j)=\boldsymbol{U}\boldsymbol{D}(i,j)\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{8.12.14}$$

然而，由于实际中使用的样本自相关矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}_{xx}(\tau),\tau=1,2,\cdots,p$ 或样本累积量矩阵都存在估计误差，所以矩阵的联合对角化只能近似实现。

如果抽去信号处理问题的不同物理涵义，即可将若干个矩阵的近似联合对角化变成一个带有共性的数学问题：

考虑 K 个 $N\times N$ 复矩阵的集合 $\mathcal{A}=\{\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\cdots,\boldsymbol{A}_K\}$。现在希望求一个联合对角化器 (joint diagonalizer) $\boldsymbol{U}\in C^{N\times N}$ 和 K 个对应的对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}_1,\boldsymbol{\Lambda}_2,\cdots,\boldsymbol{\Lambda}_K$，使目标函数

$$J(\boldsymbol{U},\boldsymbol{\Lambda}_1,\boldsymbol{\Lambda}_2,\cdots,\boldsymbol{\Lambda}_K)=\sum_{k=1}^{K}w_k\left\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_k\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}}^2 \tag{8.12.15}$$

最小化，式中，$w_1,w_2,\cdots,w_K$ 为正的权系数。这一优化问题称为近似联合对角化。为方便计，下面的讨论假定 $w_1=w_2=\cdots=w_K=1$。

值得指出的是，两个 $n\times n$ Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的 (精确) 联合对角化与 Hermitian 矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征值分解等价。根据定义，两个 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的联合对角化就是确定酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}_A,\boldsymbol{\Lambda}_B$ 使得

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_A\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}},\quad \boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_B\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{8.12.16}$$

式中

$$\begin{aligned}\{\boldsymbol{U},\boldsymbol{\Lambda}_A,\boldsymbol{\Lambda}_B\} &= \arg\min J(\boldsymbol{U},\boldsymbol{\Lambda}_A,\boldsymbol{\Lambda}_B)\\ &= \arg\min\left\{\left\|\boldsymbol{A}-\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_A\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}}^2+\left\|\boldsymbol{B}-\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_B\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}}^2\right\}\end{aligned} \tag{8.12.17}$$

显然，若 $\boldsymbol{B}$ 正定，则 $\boldsymbol{B}^{-1}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_B^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$。因此，有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{B}^{-1}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_A\boldsymbol{\Lambda}_B^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{8.12.18}$$

式中

$$\boldsymbol{\Lambda}=\boldsymbol{\Lambda}_A\boldsymbol{\Lambda}_B^{-1}=\mathrm{diag}(\lambda_1^{(A)}/\lambda_1^{(B)},\lambda_2^{(A)}/\lambda_2^{(B)},\cdots,\lambda_n^{(A)}/\lambda_n^{(B)}) \tag{8.12.19}$$

以上结果可以归结为下面的命题。

命题 8.12.1 满足 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 的联合对角化酉矩阵 $\boldsymbol{U}$ 与矩阵束 $(\boldsymbol{A},\boldsymbol{B})$ 的广义特征矩阵相同，而对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}_A,\boldsymbol{\Lambda}_B$ 与广义特征值矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 之间存在关系 $\boldsymbol{\Lambda}=\boldsymbol{\Lambda}_A\boldsymbol{\Lambda}_B^{-1}$。

8.12.2 近似联合对角化算法

如前所述，近似联合对角化就是根据给定的 K 个矩阵 $\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\cdots,\boldsymbol{A}_K$，求解使得式 (8.12.15) 最小化的联合对角化器 $\boldsymbol{U}$ 以及相对应的对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}_1,\boldsymbol{\Lambda}_2,\cdots,\boldsymbol{\Lambda}_K$。然而，在很多工程应用中，只使用联合对角化器 $\boldsymbol{U}$，不需要对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}_1,\boldsymbol{\Lambda}_2,\cdots,\boldsymbol{\Lambda}_K$。因此，如何将近似联合对角化问题简化，转换成只包含联合对角化器 $\boldsymbol{U}$ 的最优化问题，便是一个有着实际意义的问题。

1. 最小二乘算法

考虑加权系数相同的情况。此时，由于 $\|\cdot\|_{\mathrm{F}}^2\geqslant 0$，故联合对角化式 (8.12.15) 可以等价写作

$$\min\sum_{k=1}^{K}\left\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_k\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}}^2=\sum_{k=1}^{K}\min\left\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_k\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}}^2 \tag{8.12.20}$$

式中，$\boldsymbol{U}$ 为酉矩阵。

下面分析 $\min\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_k\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\|_{\mathrm{F}}^2$ 的最小化。显而易见，对于 $\boldsymbol{A}_k\in C^{n\times n}$，有

$$\min\left\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_k\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}}^2=\min\left\|\boldsymbol{A}_k-\sum_{i=1}^{n}d_k(i)\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\right\|_{F}^2 \tag{8.12.21}$$

定义

$$\boldsymbol{W}=[\mathrm{vec}(\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\mathrm{H}}),\mathrm{vec}(\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{u}_2^{\mathrm{H}}),\cdots,\mathrm{vec}(\boldsymbol{u}_n\boldsymbol{u}_n^{\mathrm{H}})]\in C^{n^2\times n} \tag{8.12.22}$$

利用向量化函数的恒等式

$$\mathrm{vec}(\boldsymbol{ABC})=(\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\otimes\boldsymbol{A})\mathrm{vec}(\boldsymbol{B}) \tag{8.12.23}$$

可将 $\boldsymbol{W}$ 改写为向量的 Kronecker 积形式：

$$\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{u}_1^* \otimes \boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2^* \otimes \boldsymbol{u}_2, \boldsymbol{u}_n^* \boldsymbol{u}_n] \tag{8.12.24}$$

利用矩阵 $\boldsymbol{U}$ 的酉性及恒等式

$$(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B})(\boldsymbol{C} \otimes \boldsymbol{D}) = (\boldsymbol{AC}) \otimes (\boldsymbol{BD}) \tag{8.12.25}$$

得到

$$\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}_n \tag{8.12.26}$$

定义

$$\boldsymbol{d}_k = [d_k(1), d_k(2), \cdots, d_k(n)]^{\mathrm{T}} \tag{8.12.27}$$

则式 (8.12.2) 可表示为

$$\min \left\| \boldsymbol{A}_k - \sum_{i=1}^{K} d_i \boldsymbol{u}_i \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}} \right\|_{\mathrm{F}}^2 = \min \|\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k - \boldsymbol{W}\boldsymbol{d}_k)\|_2^2 \tag{8.12.28}$$

这是一个大家所熟悉的最小二乘问题，其解为

$$\boldsymbol{d}_k = (\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k) \tag{8.12.29}$$

由式 (8.12.20) ~ 式 (8.12.22) 可得到对角化矩阵的解为

$$\hat{\boldsymbol{U}} = \arg\min_{\boldsymbol{U}} \sum_{k=1}^{K} \left\| \mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k) - \boldsymbol{W}\hat{\boldsymbol{d}}_k \right\|_2^2 \tag{8.12.30}$$

将式 (8.12.29) 的 $\hat{\boldsymbol{d}}_k$ 代入式 (8.12.30)，并利用式 (8.12.26)，则有

$$\begin{aligned}
\hat{\boldsymbol{U}} &= \arg\min_{\boldsymbol{U}} \sum_{k=1}^{K} \left\| \left[\boldsymbol{I} - \boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\right] \mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k) \right\|_2^2 \\
&= \arg\max_{\boldsymbol{U}} \sum_{k=1}^{K} \left\| \boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k) \right\|_2^2 \\
&= \arg\max_{\boldsymbol{U}} \sum_{k=1}^{K} \left\| \boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k) \right\|_2^2 \\
&= \arg\max_{\boldsymbol{U}} \sum_{k=1}^{K} \left\| \boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k) \right\|_2^2
\end{aligned} \tag{8.12.31}$$

利用式 (8.12.23) 和式 (8.12.24)，知

$$\begin{aligned}
\left\| \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k) \right\|_2^2 &= \sum_{l=1}^{n} \|(\boldsymbol{u}_l^* \otimes \boldsymbol{u}_l)^{\mathrm{H}}\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k)\|_2^2 \\
&= \sum_{l=1}^{n} \left| \boldsymbol{u}_l^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{u}_l \right|^2
\end{aligned} \tag{8.12.32}$$

将式 (8.12.32) 代入式 (8.12.31)，立即得

$$\hat{\boldsymbol{U}} = \arg\max_{\boldsymbol{U}} \sum_{k=1}^{K} \sum_{l=1}^{n} \left| \boldsymbol{u}_l^{\mathrm{H}} \boldsymbol{C}_k \boldsymbol{u}_l \right|^2$$

或写作

$$\hat{\boldsymbol{U}} = \arg\max_{\boldsymbol{U}} \sum_{k=1}^{K} \left\| \mathrm{diag}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{U}) \right\|_{\mathrm{F}}^2 \tag{8.12.33}$$

这表明，联合对角化矩阵 $\boldsymbol{U}$ 可通过最小二乘方法求解上式得到。这一方法是 Wax 与 Sheinvald 于 1997 年提出的 [472]。

2. Jacobi 算法

在数值分析中，一个正方矩阵 $\boldsymbol{M} = [M_{ij}]$ 所有非主对角线元素的绝对值的平方和定义为该矩阵的 off 函数，即

$$\mathrm{off}(\boldsymbol{M}) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{i=1,\, i\neq j}^{n} \sum_{j=1}^{n} |M_{ij}|^2 \tag{8.12.34}$$

利用 off 函数，可以改写联合对角化的目标函数。

由定义知，联合对角化的目标函数也可以等价写作

$$J(\boldsymbol{U}, \boldsymbol{A}_1, \boldsymbol{A}_2, \cdots, \boldsymbol{A}_n) = \sum_{k=1}^{K} \left\| \boldsymbol{A}_k - \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{U} \right\|_{\mathrm{F}}^2 \tag{8.12.35}$$

或者

$$J(\boldsymbol{U}) = \sum_{k=1}^{K} \mathrm{off}(\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{A}_k \boldsymbol{U}) \tag{8.12.36}$$

从这一目标函数出发，Cardoso 等人 [72],[37] 提出了近似联合对角化的 Jacobi 算法。这一算法是对角化单个 Hermitian 矩阵的 Jacobi 算法 [184] 的推广，其基本思想是使用一连串 Givens 旋转，使目标函数式 (8.12.36) 最小化。具体做法是，对 K 个 2×2 子矩阵

$$\boldsymbol{C}_k^{(p)} = \begin{bmatrix} a_k & b_k \\ c_k & d_k \end{bmatrix}, \quad k = 1, 2, \cdots, K \tag{8.12.37}$$

求解相同的问题：寻找一个 2×2 酉矩阵 $\boldsymbol{G}$ 使得

$$\boldsymbol{C}_k' = \boldsymbol{G}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{C}_k \boldsymbol{G}, \quad k = 1, 2, \cdots, K \tag{8.12.38}$$

能够最小化式 (8.12.36) 定义的目标函数 J，其中

$$\boldsymbol{G} = \begin{bmatrix} \cos\theta & \mathrm{e}^{\mathrm{j}\phi} \sin\theta \\ -\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\phi} \sin\theta & \cos\theta \end{bmatrix} \tag{8.12.39}$$

记矩阵 $\boldsymbol{C}_k'$ 的元素为 a_k', b_k', c_k', d_k'，则式 (8.12.36) 的最优化就是求 θ, ϕ，使得 $\sum_{k=1}^{k} |a_k'|^2 + |d_k'|^2$ 最大化。注意到 $2(|a_k'|^2 + |d_k'|^2) = |a_k' - d_k'|^2 + |a_k' + d_k'|^2$，并且迹 $a_k' + d_k'$ 是相对于

酉不变的，所以式 (8.12.36) 的最优化等价为

$$Q=\sum_{k=1}^{K}|a_k'-d_k'|^2 \tag{8.12.40}$$

最大化。

容易验证，对于 $k=1,2,\cdots,K$，有

$$a_k'-d_k'=(a_k-d_k)\cos 2\theta-(b_k+c_k)\sin 2\theta\cos\phi-\mathrm{j}\,(c_k-b_k)\sin 2\theta\sin\phi \tag{8.12.41}$$

若定义

$$\boldsymbol{u}=[a_1'-d_1',a_2'-d_2',\cdots,a_K'-d_K']^{\mathrm{T}} \tag{8.12.42}$$

$$\boldsymbol{v}=[\cos 2\theta,-\sin 2\theta\cos\phi,-\sin 2\theta\sin\phi] \tag{8.12.43}$$

$$\boldsymbol{g}_k=[a_k-d_k,b_k+c_k,\mathrm{j}\,(c_k-b_k)]^{\mathrm{T}} \tag{8.12.44}$$

则式 (8.12.41) 中的 K 个方程可以合并写作矩阵方程 $\boldsymbol{u}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{v}$，其中，$\boldsymbol{G}=[\boldsymbol{g}_1,\boldsymbol{g}_2,\cdots,\boldsymbol{g}_K]$。于是，式 (8.12.40) 的目标函数 Q 可以改写为

$$Q=\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}=\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G}\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\mathrm{Re}(\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G})\boldsymbol{v} \tag{8.12.45}$$

由式 (8.12.43) 易知 $\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}=1$。因此，目标函数可以等价写作

$$Q=\frac{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\mathrm{Re}(\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G})\boldsymbol{v}}{\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{v}} \tag{8.12.46}$$

这恰好是熟知的 Rayleigh 商。显然，当 $\boldsymbol{v}$ 是与矩阵 $\mathrm{Re}(\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G})$ 的最大特征值对应的特征向量时，Q 取极大值。由特征向量 $\boldsymbol{v}$，即可求出 Givens 旋转的参数 θ 和 ϕ。

对矩阵 $\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\cdots,\boldsymbol{A}_K$ 的非对角元素实施一系列的 Given 旋转，即可实现这些矩阵的联合对角化。所有 Givens 旋转矩阵的乘积即给出联合对角化器 $\boldsymbol{U}$。这就是 Cardoso 等人提出的近似联合对角化的 Jacobi 算法 [72],[37]。

3. 子空间算法

一般地，给定 K 个 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}_1,\boldsymbol{A}_2,\cdots,\boldsymbol{A}_K$ 的情况下，近似联合对角化问题的解可以写作

$$\{\boldsymbol{U},\boldsymbol{\Lambda}_1,\cdots,\boldsymbol{\Lambda}_K\}=\arg\min_{\boldsymbol{U},\boldsymbol{\Lambda}_1,\cdots,\boldsymbol{\Lambda}_K}\sum_{k=1}^{K}\left\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_k\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}}^2 \tag{8.12.47}$$

式中，$\boldsymbol{\Lambda}_k$ 是实的对角矩阵。在正交近似联合对角化的情况下，联合对角化器 $\boldsymbol{U}$ 为酉矩阵，其列向量具有单位范数，即 $\|\boldsymbol{u}_k\|_{\mathrm{F}}=1$。

定义 $\boldsymbol{m}_k=\mathrm{diag}(\boldsymbol{\Lambda}_k)$ 是由对角矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$ 的对角元素组成的向量，并令

$$\hat{\boldsymbol{A}}=[\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_1),\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_2),\cdots,\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_K)]$$

$$\boldsymbol{M}=[\boldsymbol{m}_1,\boldsymbol{m}_2,\cdots,\boldsymbol{m}_K]$$

则联合对角化问题的代价函数可以等价写为

$$\sum_{k=1}^{K}\left\|\boldsymbol{A}_k-\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}_k\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\right\|_{\mathrm{F}}^2=\sum_{k=1}^{K}\|\mathrm{vec}(\boldsymbol{A}_k)-(\boldsymbol{U}^*\circ\boldsymbol{U})\mathrm{diag}(\boldsymbol{\Lambda}_k)\|_{\mathrm{F}}^2$$
$$=\left\|\hat{\boldsymbol{A}}-(\boldsymbol{U}^*\circ\boldsymbol{U})\boldsymbol{M}\right\|_{\mathrm{F}}^2 \tag{8.12.48}$$

式中，$\boldsymbol{C}\circ\boldsymbol{D}$ 是矩阵的 Khatri-Rao 积，它是矩阵列分量的 Kronecker 积，即

$$\boldsymbol{C}\circ\boldsymbol{D}=[\boldsymbol{c}_1\otimes\boldsymbol{d}_1,\boldsymbol{c}_2\otimes\boldsymbol{d}_2,\cdots,\boldsymbol{c}_n\otimes\boldsymbol{d}_n] \tag{8.12.49}$$

于是，联合对角化问题的解式 (8.12.47) 可以换写为

$$\{\boldsymbol{U},\boldsymbol{M}\}=\arg\min_{\boldsymbol{U},\boldsymbol{M}}\left\|\hat{\boldsymbol{A}}-\boldsymbol{B}\boldsymbol{M}\right\|_{\mathrm{F}}^2,\qquad \boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}^*\circ\boldsymbol{U} \tag{8.12.50}$$

这一最优化问题是可分离的，因为 $\boldsymbol{M}$ 的最小二乘解为

$$\boldsymbol{M}=(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{A}} \tag{8.12.51}$$

将式 (8.12.51) 代入式 (8.12.50) 后，又可消去 $\boldsymbol{M}$，并得到

$$\boldsymbol{U}=\arg\min_{\boldsymbol{U}}\left\|\hat{\boldsymbol{A}}-\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{A}}\right\|_{\mathrm{F}}^2=\arg\min_{\boldsymbol{U}}\left\|\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{B}}^{\perp}\hat{\boldsymbol{A}}\right\|_{\mathrm{F}}^2 \tag{8.12.52}$$

式中，$\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{B}}^{\perp}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{B}(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}$ 为正交投影矩阵。求解最优化问题式 (8.12.52) 的具体算法可参考文献 [457]。

上面介绍的三种算法都属于正交近似联合对角化算法，因为它们给出的联合对角化器为酉矩阵。如果不对联合对角化器加正交约束，即得到所谓的非正交近似联合对角化问题。

对非正交近似联合对角化算法有兴趣的读者，可以参考文献 [493]。

8.12.3 近似联合对角化的另一种解法

在前面讨论的盲信号分离中，定理 8.12.1 表明分离矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的联合对角化结果是混合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 的本质相等矩阵，即 $\boldsymbol{W}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{G}=\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{P}\boldsymbol{D}$，式中，$\boldsymbol{G}$ 是 $m\times m$ 广义置换矩阵。

最近，文献 [152] 提出了求解盲信号分离的联合对角化问题的另一种解法。这一解法是一种二步方法：第一步为降维，第二步为联合对角化。

令矩阵 $\boldsymbol{T}$ 为 $m\times n$ 矩阵，它的列空间与混合矩阵的列空间相等，即

$$\mathrm{Col}(\boldsymbol{T})=\mathrm{Col}(\boldsymbol{A}) \tag{8.12.53}$$

这意味着 $\boldsymbol{T}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 一样，也是满列秩矩阵。由于 $\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 为 $n\times n$ 矩阵，并且 $n<m$，故可将 $n\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{T}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}$ 视为 $m\times n$ 混合矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的降维结果。在这一意义上，$m\times n$ 矩阵 $\boldsymbol{T}$ 称为降维矩阵。

令

$$C=\sum_{k=1}^{K}R_x^{\mathrm{H}}(\tau_k)R_x(\tau_k) \tag{8.12.54}$$

其特征值分解为

$$C=V^{\mathrm{H}}DV \tag{8.12.55}$$

通过比较特征值的大小，即可得到 n 个主特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_n$ 以及与之对应的特征向量 $v_1,v_2,\cdots,v_n$。由于 $\mathrm{Span}\{v_1,v_2,\cdots,v_n\}=\mathrm{Col}(A)$，故可以令 $m\times n$ 降维矩阵

$$T=[v_1,v_2,\cdots,v_n] \tag{8.12.56}$$

显然，它满足 $T^{\mathrm{H}}T=I_n$。

获得降维矩阵 T，可以直接将 $m\times 1$ 观测数据向量 $x(t)$ 降为 $n\times 1$ 向量 $z(t)$，即有

$$z(t)=T^{\mathrm{H}}x(t)=T^{\mathrm{H}}As(t)+T^{\mathrm{H}}v(t) \tag{8.12.57}$$

由于 A 和 T 张成相同的列空间，所以存在一个 $n\times n$ 非奇异矩阵 B_0 使得

$$A=TB_0 \tag{8.12.58}$$

用 T^{H} 左乘上式两边，并使用 $T^{\mathrm{H}}T=I_n$ 的结果，立即有 $T^{\mathrm{H}}A=B_0$。利用这一关系，可以将式 (8.12.57) 改写为

$$z(t)=B_0s(t)+T^{\mathrm{H}}v(t) \tag{8.12.59}$$

其自相关矩阵为

$$R_z(0)=\mathrm{E}\{z(t)z^{\mathrm{H}}(t)\}=B_0\mathrm{diag}[\rho_1(0),\rho_2(0),\cdots,\rho_n(0)]B_0^{\mathrm{H}}+T^{\mathrm{H}}R_vT \tag{8.12.60}$$

$$R_z(\tau)=\mathrm{E}\{z(t)z^{\mathrm{H}}(t-\tau)\}=B_0\mathrm{diag}[\rho_1(\tau),\rho_2(\tau),\cdots,\rho_n(\tau)]B_0^{\mathrm{H}},\ \tau\neq 0 \tag{8.12.61}$$

式中，$R_z(\tau)=T^{\mathrm{H}}R_x(\tau)T$。式 (8.12.60) 和式 (8.12.61) 表明，若取 $\tau\neq 0$，则可以在完全抑制加性噪声向量 $v(t)$ 的情况下，由式 (8.12.61) 辨识出 $n\times n$ 矩阵 B_0，而式 (8.12.61) 是一个典型的联合对角化问题。

一旦通过求解联合对角化问题式 (8.12.61)，得到 $n\times n$ 矩阵 B_0 后，便可以由式 (8.12.59) 直接得到信号分离结果为

$$\hat{s}(t)=B_0^{\dagger}z(t) \tag{8.12.62}$$

因此，现在的问题变成了是否能够利用式 (8.12.61)，直接辨识 $B^{\dagger}$，而不是 B_0 本身。这个问题的答案是肯定的，其关键是引入向量的双正交。

定义 $n\times n$ 非奇异矩阵 $B_0=[b_{01},b_{02},\cdots,b_{0n}]$ 及其逆矩阵 $B^{-1}=[b_{01}^{\dagger},b_{02}^{\dagger},\cdots,b_{0n}^{\dagger}]$。由 $B^{-1}B=BB^{-1}=I_n$ 知

$$(b_{0i}^{\dagger})^{\mathrm{H}}b_{0j}=b_{0j}^{\mathrm{H}}b_{0i}^{\dagger}=\delta(i-j) \tag{8.12.63}$$

这一关系称为矩阵 $\boldsymbol{B}$ 与逆矩阵的列向量之间的双正交关系 (biorthogonality relation)。

双正交关系也可以用子空间形式写成

$$\boldsymbol{b}_{0i} \perp \text{Span}\{\boldsymbol{b}_{01}^{\dagger},\cdots,\boldsymbol{b}_{0,i-1}^{\dagger},\boldsymbol{b}_{0,i+1}^{\dagger},\cdots,\boldsymbol{b}_{0n}^{\dagger}\},\quad i=1,2,\cdots,n \tag{8.12.64}$$

$$\boldsymbol{b}_{0i}^{\dagger} \perp \text{Span}\{\boldsymbol{b}_{01},\cdots,\boldsymbol{b}_{0,i-1},\boldsymbol{b}_{0,i+1},\cdots,\boldsymbol{b}_{0n}\},\quad i=1,2,\cdots,n \tag{8.12.65}$$

注意到式 (8.12.61) 可以等价写作

$$\boldsymbol{R}_z(\tau)=\sum_{i=1}^{n}\rho_i(\tau)\boldsymbol{b}_{0i}\boldsymbol{b}_{0i}^{\mathrm{H}},\quad \tau\neq 0 \tag{8.12.66}$$

上式两边右乘 $\boldsymbol{b}_{0j}^{\dagger}$，并利用双正交关系式 (8.12.63)，立即有

$$\boldsymbol{R}_z(\tau)\boldsymbol{b}_{0j}^{\dagger}=\rho_j(\tau)\boldsymbol{b}_{0j},\quad \tau\neq 0,\ j=1,2,\cdots,n \tag{8.12.67}$$

取式 (8.12.66) 的复共轭转置，再右乘 $\boldsymbol{b}_{0j}^{\dagger}$，又得

$$\boldsymbol{R}_z^{\mathrm{H}}(\tau)\boldsymbol{b}_{0j}^{\dagger}=\rho_j^*(\tau)\boldsymbol{b}_{0j},\quad \tau\neq 0,\ j=1,2,\cdots,n \tag{8.12.68}$$

式 (8.12.67) 和式 (8.12.68) 启迪了求 $\boldsymbol{b}_{0i}$ 的目标函数

$$J(\boldsymbol{w};c_1,\cdots,c_K)=\sum_{k=1}^{K}\left\|\boldsymbol{R}_z(\tau_k)\boldsymbol{w}-c_k\boldsymbol{R}_z^{\mathrm{H}}(\tau_k)\boldsymbol{w}\right\|_2^2 \tag{8.12.69}$$

显然，若 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{b}_{0i}^{\dagger}$，$c_k=\rho_i(\tau_k)/\rho_i^*(\tau_k),k=1,2,\cdots,K$，则 $J_1(\boldsymbol{w};c_1,\cdots,c_K)=0$，即 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{b}_{0i}^{\dagger}$ 和 $c_k=\rho_i(\tau_k)/\rho_i^*(\tau_k),k=1,2,\cdots,K$ 是 $J(\boldsymbol{w};c_1,\cdots,c_K)$ 的全局极小点。

无约束优化问题 $\min J(\boldsymbol{w};c_1,\cdots,c_K)$ 的求解可以使用迭代法：先随机产生一个向量 $\boldsymbol{w}$，用它作初始值代入式 (8.12.69)，再使 J 最小化，得到 $c_1,\cdots,c_K$。然后，将 $c_1,\cdots,c_K$ 代入式 (8.12.69)，通过使 J 最小化，又可更新 $\boldsymbol{w}$ 的估计。有关算法的具体实现，读者可进一步参考文献 [152]。

联合对角化问题广泛存在于盲信号分离 [9],[37],[154],[323],[493]、盲波束形成 [72]、时延估计 [494]、频率估计 [312]、阵列信号处理 [474]、多输入 – 多输出 (MIMO) 盲均衡 [103] 以及盲 MIMO 系统辨识 [82] 等中，并已获得诸多成功的应用。

8.13 特征分析与 Fourier 分析

特征分析与 Fourier 分析有着密切的关系。为了解释清楚这种关系，有必要先介绍线性算子。

8.13.1 线性算子

在很多情况下，我们对某些向量的集合感兴趣。

定义 8.13.1 令 U 和 V 是两个向量空间，$\mathcal{L}$ 是从 U 到 V 的一个函数，即 $\mathcal{L}: U \mapsto V$。称 $\mathcal{L}$ 是线性算子 (linear operator)，若对于所有标量 a_1, a_2 和 V 中的所有向量 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2$，有

$$\mathcal{L}[a_1\boldsymbol{x}_1 + a_2\boldsymbol{x}_2] = a_1\mathcal{L}[\boldsymbol{x}_1] + a_2\mathcal{L}[\boldsymbol{x}_2] \tag{8.13.1}$$

线性算子也称线性变换 (linear transformation) 或线性映射 (linear mapping)。

若对任意非零向量 $\boldsymbol{w}$ 恒有 $\mathcal{L}[\boldsymbol{w}] = \boldsymbol{w}$，则称 $\mathcal{L}$ 为恒等变换 (identity trnsformation)。当一个线性算子作用于一向量时，如果仍然输出此向量，便称该线性算子具有输入重生 (input-reproducing) 特性。输入重生有两种情况：

(1) 对任何非零输入向量，线性算子的输出向量都与输入向量完全相同 (恒等算子即属这种情况)。

(2) 只是对某些特定的输入向量，线性算子的输出向量才与输入向量相同，并且还相差一个常数因子。

定义 8.13.2 若非零向量 $\boldsymbol{u}$ 作为线性算子 $\mathcal{L}$ 的输入时，所产生的输出与输入相同 (顶多相差一个常数因子 λ)，即

$$\mathcal{L}[\boldsymbol{u}] = \lambda\boldsymbol{u}, \quad \boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0} \tag{8.13.2}$$

则称向量 $\boldsymbol{u}$ 是线性算子 $\mathcal{L}$ 的特征向量，称标量为线性算子 $\mathcal{L}$ 的特征值。

工程应用中最常用的线性算子或线性变换当属线性时不变系统，其一连串的输入可以视为向量，对应的输出也为向量形式。由上述定义知，若将每一个特征向量 $\boldsymbol{u}$ 视为线性时不变系统的输入，那么与每一个特征向量对应的特征值 λ 就相当于线性系统 $\mathcal{L}$ 输入该特征向量时的增益。由于只有当特征向量 $\boldsymbol{u}$ 作线性系统 $\mathcal{L}$ 的输入时，系统的输出才具有与输入相同 (除相差一个倍数因子外) 这一重要特征，所以特征向量 (eigenvector) 可以看作是表征系统特征性质的向量，其英文名又叫 characteristic vector。这就从线性系统的观点，给出了特征向量的物理解释。

特别地，我们来考虑使用复指数函数或复谐波信号 $\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega n}$ 作为线性时不变系统 $\mathcal{L}$ 的输入。令线性系统的传递函数为 $H(\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega}) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} h(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\omega k}$，其中，$h(k)$ 称为系统的冲激响应系数。由于系统的输出是系统输入与系统冲激响应的卷积和，故有

$$\mathcal{L}[\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega n}] = \sum_{k=-\infty}^{\infty} h(n-k)\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega k} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} h(k)\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega(n-k)} = H(\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega})\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega n} \tag{8.13.3}$$

令 $n = 0, 1, \cdots, N-1$，则有

$$\mathcal{L}\begin{bmatrix} 1 \\ \mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega} \\ \vdots \\ \mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega(N-1)} \end{bmatrix} = H(\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega})\begin{bmatrix} 1 \\ \mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega} \\ \vdots \\ \mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega(N-1)} \end{bmatrix}$$

或简写为

$$\mathcal{L}[\boldsymbol{w}(\omega)] = H(\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega})\boldsymbol{w}(\omega) \tag{8.13.4}$$

式中

$$\boldsymbol{w}(\omega)=[1,\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega},\cdots,\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega(N-1)}]^{\mathrm{T}} \tag{8.13.5}$$

式 (8.13.4) 表明，向量 $\boldsymbol{w}(\omega)=[1,\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega},\cdots,\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega(N-1)}]^{\mathrm{T}}$ 是线性时不变系统的特征向量，而系统传递函数 $H(\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega})$ 是与 $\boldsymbol{w}(\omega)$ 相对应的特征值。由于对于每个频率 ω，式 (8.13.4) 都成立，所以线性时不变系统有无穷多个特征向量 $\boldsymbol{w}(\omega), \omega=-\infty,\cdots,\infty$，相对应的特征值也有无穷多个，它们是 $H(\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega}), \omega=-\infty,\cdots,\infty$。

由 $\mathcal{L}[\boldsymbol{u}]=\lambda\boldsymbol{u}$ 表示的特征系统 (cigensystem) 可以推广为 [239]

$$\mathcal{L}[\boldsymbol{u}]=\lambda\mathcal{L}_c[\boldsymbol{u}], \qquad \boldsymbol{u}\neq\boldsymbol{0} \tag{8.13.6}$$

这一推广的特征系统由两个线性系统共同组成：两个线性系统都以向量 $\boldsymbol{u}$ 作为输入，但第一个线性系统 $\mathcal{L}$ 的输出 $\mathcal{L}[\boldsymbol{u}]$ 是第二个线性系统 $\mathcal{L}_c$ 的输出 $\mathcal{L}_c[\boldsymbol{u}]$ 的某个常数倍。常数 λ 是两个线性系统组成的广义特征系统的特征值 (即广义特征值)，它们的共同输入向量 $\boldsymbol{u}$ 是与广义特征值 λ 对应的广义特征向量。

8.13.2 Fourier 分析与特征分析

Fourier 分析是一种非常有用的数学工具，广泛应用于数学、物理、信息科学和诸多工程学科。Fourier 分析由 Fourier 级数和 Fourier 积分变换两部分组成。

一个周期为 T 的平稳的周期随机过程 $x(t)$ 可以用 Fourier 级数展开为

$$x(t)=\sum_{k=-\infty}^{\infty}c_k\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,k\omega_0 t} \tag{8.13.7}$$

式中，$\omega_0=2\pi/T$ 为角频率，c_k 称为展开系数或 Fourier 系数，由 Fourier 变换

$$c_k=\frac{1}{T}\int_0^T x(t)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\,k\omega_0 t}\mathrm{d}t \tag{8.13.8}$$

确定。

对随机过程的周期性要求可以保证展开系数 c_k 和 c_n 在 $k\neq n$ 的情况下相互正交。其证明如下。

由式 (8.13.8) 易求得

$$\mathrm{E}\{c_k c_n^*\}=\frac{1}{T^2}\mathrm{E}\left\{\int_0^T\int_0^T x(t)x^*(u)\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,k\omega_0 t}\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\,n\omega_0 s}\mathrm{d}t\mathrm{d}u\right\} \tag{8.13.9}$$

$$=\frac{1}{T^2}\int_0^T\int_0^T R(t-u)\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_0(kt-nu)}\mathrm{d}t\mathrm{d}u \tag{8.13.10}$$

式中，$R(t-u)=\mathrm{E}\{x(t)x^*(u)\}$ 是周期随机过程 $x(t)$ 的相关函数，它也是周期函数。令滞后 (lag) $\tau=t-u$，则

$$R(\tau)=\sum_{m=-\infty}^{\infty}b_m\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,m\omega_0\tau} \tag{8.13.11}$$

将上式代入式 (8.13.10)，得

$$\begin{aligned}\mathrm{E}\{c_k c_n^*\} &= \frac{1}{T^2}\int_0^T\int_0^T \sum_{m=-\infty}^{\infty} b_m \mathrm{e}^{\mathrm{j}\, m\omega_0(t-u)}\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_0(nu-kt)}\mathrm{d}t\mathrm{d}u \\ &= \sum_{m=-\infty}^{\infty} b_m \frac{1}{T}\int_0^T \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_0(m-k)t}\mathrm{d}t\frac{1}{T}\int_0^T \mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega_0(m-n)u}\mathrm{d}u \\ &= \begin{cases}1, & k=n\\ 0, & k\neq n\end{cases}\end{aligned}$$

即当 $k \neq n$ 时，展开系数 c_k 和 c_n 正交。反之，也可以证明，欲使展开系数正交，则平稳的随机过程必须是周期函数。

一个平稳的非周期随机过程不可能用相互正交的系数展开为 Fourier 级数形式，但可以用相互正交的系数展开为正交函数 $\phi_k(t)$ 的级数形式。这种方法称为 Karhunen-Loeve 展开。

假定一个平稳的非周期随机过程 $x(t)$ 的时间定义域为区间 $[a,b]$，则 $x(t)$ 可以用级数形式展开为

$$x(t) = \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k c_k \phi_k(t) \tag{8.13.12}$$

式中，α_k 是实或复常数，并且

$$\int_a^b \phi_k(t)\phi_n^*(t)\mathrm{d}t = \begin{cases}1, & k=n\\ 0, & k\neq n\end{cases} \tag{8.13.13}$$

$$\mathrm{E}\{c_k c_n^*\} = \begin{cases}1, & k=n\\ 0, & k\neq n\end{cases} \tag{8.13.14}$$

用 $\phi_n^*(t)$ 乘式 (8.13.12) 的两边，再对时间 t 在区间 $[a,b]$ 内积分，并且使用式 (8.13.13)，易知

$$c_k = \frac{1}{\alpha_k}\int_a^b x(t)\phi_k^*(t)\mathrm{d}t \tag{8.13.15}$$

式 (8.13.12) 称为随机过程 $x(t)$ 的 Karhunen-Loeve 展开，是一种正交展开；而积分变换式 (8.13.15) 称为 $x(t)$ 的 Karhunen-Loeve 变换。因此，使用 Karhunen-Loeve 展开和 Karhunen-Loeve 变换对随机过程进行分析时，需要确定复常数 α_k 和正交基函数 $\phi_k(t)$。

计算随机过程的自相关函数，并利用展开系数的正交式 (8.13.14)，立即有

$$\begin{aligned}R(t,u) &= \mathrm{E}\{x(t)x^*(u)\} \\ &= \mathrm{E}\left\{\sum_{k=1}^{\infty}\alpha_k c_k \phi_k(t)\sum_{n=1}^{\infty}\alpha_n^* c_n^* \phi_n^*(u)\right\} \\ &= \sum_{k=1}^{\infty}|\alpha_k|^2 \phi_k(t)\phi_k^*(u)\end{aligned} \tag{8.13.16}$$

由上式及式 (8.13.13) 得

$$\int_a^b R(t,u)\phi_i(u)\mathrm{d}u = \sum_{k=1}^{\infty}|\alpha_k|^2\phi_k(t)\int_a^b \phi_i(u)\phi_k^*(u)\mathrm{d}u = |\alpha_i|^2\phi_i(t) \tag{8.13.17}$$

这表明，复常数的模平方 $|\alpha_i|^2$ 是积分方程的特征值 λ，基函数 $\phi_i(t)$ 是与该特征值对应的特征函数 $\phi(t)$，即

$$\int_a^b R(t,u)\phi(u)\mathrm{d}u = \lambda\phi(t) \tag{8.13.18}$$

以上讨论的是连续时间的单个平稳非周期随机过程的情况。下面考查 m 个离散时间的平稳非周期随机过程 $x_i(n)\,(n=1,2,\cdots,N,\ i=1,2,\cdots,m)$ 的级数展开表示。为此，我们先来讨论任意一个向量的坐标表示。

定理 8.13.1 令 V 是一向量空间，并且 $B=\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p\}$ 是 V 空间的一组基向量。对于 V 空间内的每一个向量 $\boldsymbol{w}$，存在唯一的一组标量，使得 $\boldsymbol{w}$ 可以表示成

$$\boldsymbol{w} = w_1\boldsymbol{u}_1 + w_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + w_p\boldsymbol{u}_p \tag{8.13.19}$$

证明 假定 $\boldsymbol{w}\in V$ 有两种不同的表示方式：

$$\boldsymbol{w} = w_1\boldsymbol{u}_1 + w_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + w_p\boldsymbol{u}_p$$
$$\boldsymbol{w} = \alpha_1\boldsymbol{u}_1 + \alpha_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + \alpha_p\boldsymbol{u}_p$$

两式相减，得

$$\boldsymbol{0} = (w_1-\alpha_1)\boldsymbol{u}_1 + (w_2-\alpha_2)\boldsymbol{u}_2 + \cdots + (w_p-\alpha_p)\boldsymbol{u}_p$$

由于 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p\}$ 为基向量，它们线性无关，因此 $w_1-\alpha_1=0,\ w_2-\alpha_2=0,\ \cdots,\ w_p-\alpha_p=0$，即 $\alpha_1=w_1,\alpha_2=w_2,\cdots,\alpha_p=w_p$。即是说，当利用基 B 表示向量 $\boldsymbol{w}$ 时，不可能有两种不同的表示方式。 ■

定理 8.13.1 表明，向量空间 V 内任一向量 $\boldsymbol{w}$ 的唯一表示决定于基 $B=\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p\}$ 的选择和标量 $w_1,w_2,\cdots,w_p$ 的确定。基向量 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p$ 组成了向量表示的坐标系 (coordinate system)，而标量 $w_1,w_2,\cdots,w_p$ 称为向量 $\boldsymbol{w}$ 相对于基 B 的坐标 (coordinates)，这些坐标组成的向量

$$[\boldsymbol{w}]_B = \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_p \end{bmatrix} \tag{8.13.20}$$

称为向量 $\boldsymbol{w}$ 相对于基 B 的坐标向量 (coordinate vector)。

很自然地，与坐标轴通常应该相互垂直类似，坐标系 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p$ 最好相互正交。标准正交基 $\{\boldsymbol{w}_1,\boldsymbol{w}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p\}$ 的使用给坐标向量的确定带来很大的方便：用 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}$ 左乘式 (8.13.19)，并注意到正交性 $\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_j=\delta(i-j)$，立即有

$$w_i = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{w} = \langle\boldsymbol{u}_i,\boldsymbol{w}\rangle \tag{8.13.21}$$

换句话说，若使用标准正交基 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\}$ 作为向量 $\boldsymbol{w}$ 表示的坐标系，则 $\boldsymbol{w}$ 的坐标可以利用式 (8.13.21) 直接确定。

定理 8.13.1 构成了著名的 Karhunen-Loeve 展开的理论基础：为了寻找 m 个离散时间的平稳非周期随机过程 $x_i(n)\,(n=1,2,\cdots,N,\ i=1,2,\cdots,m)$ 的级数展开，关键是如何选择一组适合于 $x_i(n)\,(n=1,2,\cdots,N,\ i=1,2,\cdots,m)$ 的标准正交基作为坐标系。

令 $\boldsymbol{x}_i=[x_i(1),x_i(2),\cdots,x_i(N)]^{\mathrm{T}}$ 表示第 i 个随机过程的观测数据向量，$\boldsymbol{\phi}_k=[\phi_k(1),\phi_k(2),\cdots,\phi_k(N)]^{\mathrm{T}}$ 表示第 k 个正交基向量，即

$$\mathrm{E}\{\boldsymbol{\phi}_k^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\phi}_j\}=\begin{cases}1, & k=j\\ 0, & k\neq j\end{cases} \tag{8.13.22}$$

于是，Karhunen-Loeve 展开式 (8.13.12) 变为

$$\boldsymbol{x}_i=\sum_{k=1}^{N}c_{ik}\boldsymbol{\phi}_k \tag{8.13.23}$$

若令

$$\boldsymbol{c}_i=[c_{i1},c_{i2},\cdots,c_{iN}]^{\mathrm{T}} \tag{8.13.24}$$

则式 (8.13.23) 可以写成更加紧凑的形式，即

$$\boldsymbol{x}_i=\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{c}_i \tag{8.13.25}$$

式中，$\boldsymbol{\Phi}=[\boldsymbol{\phi}_1,\boldsymbol{\phi}_1,\cdots,\boldsymbol{\phi}_N]$。

将式 (8.13.25) 代入 M 个随机信号向量 $\boldsymbol{x}_1,\boldsymbol{x}_2,\cdots,\boldsymbol{x}_M$ 的相关矩阵，得

$$\boldsymbol{R}=\sum_{i=1}^{M}\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}_i\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{H}}\}=\boldsymbol{\Phi}\left(\sum_{i=1}^{M}\mathrm{E}\{\boldsymbol{c}_i\boldsymbol{c}_i^{\mathrm{H}}\}\right)\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}} \tag{8.13.26}$$

但由于要求展开系数必须相互正交，故

$$\sum_{i=1}^{M}\mathrm{E}\{\boldsymbol{c}_i\boldsymbol{c}_i^{\mathrm{H}}\}=\begin{bmatrix}\lambda_1 & & & 0\\ & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & \lambda_N\end{bmatrix}=\boldsymbol{D} \tag{8.13.27}$$

于是，式 (8.13.26) 可写为

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{D}\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}} \quad 或 \quad \boldsymbol{R}\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{\Phi}\boldsymbol{D}$$

即有

$$\boldsymbol{R}\boldsymbol{\phi}_i=\lambda_i\boldsymbol{\phi}_i,\quad i=1,2,\cdots,N \tag{8.13.28}$$

这说明，基向量 $\boldsymbol{\phi}_i$ 是 $N\times N$ 相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 的特征向量，与之对应的特征值为 λ_i。

式 (8.13.25) 两边左乘矩阵 $\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}$，并注意到正交基向量 $\boldsymbol{\phi}_i$ 满足 $\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\Phi}=\boldsymbol{I}$，即得

$$\boldsymbol{c}_i=\boldsymbol{\Phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}_i \tag{8.13.29}$$

综合定理 8.13.1 和以上讨论，利用相关矩阵的特征值和特征向量对 M 个随机过程得观测向量 $\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_M$ 进行分析的方法可以总结如下。

(1) 利用式 (8.13.25) 计算 $N \times N$ 相关矩阵 $\boldsymbol{R}$。

(2) 对相关矩阵 $\boldsymbol{R}$ 进行特征值分解，得到特征值 λ_i 及对应的特征向量 $\boldsymbol{u}_i$，$i = 1, 2, \cdots, N$。取 P 个大特征值及其对应的特征向量，组成 $P \times N$ 矩阵 $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_P]$。

(3) 利用这 P 个特征向量作标准正交基，对第 i 个随机向量的级数展开式为

$$\boldsymbol{x}_i = \sum_{k=1}^{P} c_{ik} \boldsymbol{u}_k, \quad i = 1, 2, \cdots, M \tag{8.13.30}$$

称为随机向量的线性特征向量展开 (linear eigenvector expansion)。展开式中的展开系数 c_{ik} 由

$$\boldsymbol{c}_i = \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{x}_i, \quad i = 1, 2, \cdots, M \tag{8.13.31}$$

确定，其中，$\boldsymbol{c}_i = [c_{i1}, c_{i2}, \cdots, c_{iP}]^{\mathrm{T}}$，$i = 1, 2, \cdots, M$。

如前所述，Fourier 级数和 Fourier 展开共同构成了 Fourier 分析的理论框架。与此相类似，式 (8.13.30) 和式 (8.13.31) 一起形成了对平稳非周期随机过程的分析方法。由于这种方法是基于特征值和特征向量导出的，所以很自然地可以称之为随机过程的特征分析。

对于单个随机向量，线性特征向量展开式 (8.13.30) 简化为

$$\boldsymbol{x} = \sum_{k=1}^{P} c_k \boldsymbol{u}_k \tag{8.13.32}$$

式中，展开系数 c_k 由向量的内积

$$c_k = \langle \boldsymbol{u}_k, \boldsymbol{x} \rangle, \qquad k = 1, 2, \cdots, P \tag{8.13.33}$$

确定。这恰好就是式 (8.13.21)。

线性特征向量展开式 (8.13.30) 表明，特征向量可以定义一种新的坐标系。

这一坐标系由 P 个相互垂直 (即正交) 的坐标组成。当随机向量 $\boldsymbol{x}$ 作为线性系统 $\mathcal{L}$ 的输入时，由式 (8.13.32) 知，线性系统的输出为

$$\mathcal{L}[\boldsymbol{x}] = \mathcal{L}\left[\sum_{k=1}^{P} c_k \boldsymbol{u}_k\right] = \sum_{k=1}^{P} c_k \mathcal{L}[\boldsymbol{u}_k] \tag{8.13.34}$$

由于 $\mathcal{L}[\boldsymbol{u}_k] = \lambda_k \boldsymbol{u}_k$，上式给出结果

$$\mathcal{L}[\boldsymbol{x}] = \sum_{k=1}^{P} \lambda_k c_k \boldsymbol{u}_k \tag{8.13.35}$$

这说明，如果使用特征值和特征向量，线性系统的输出 $\mathcal{L}[\boldsymbol{x}]$ 将变得容易计算。

综合以上讨论，可以看出，特征值和特征向量不仅是随机向量的线性展开的有力工具，而且也对线性系统输出的分析有着重要的作用。

式 (8.13.32) 可以用来解释随机信号的功率谱。考虑离散随机信号 $x(0),x(1),\cdots,x(N-1)$ 的功率谱。定义 Fourier 向量为

$$\boldsymbol{w}=[1,\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,\omega},\cdots,\mathrm{e}^{\mathrm{j}\,(N-1)\omega}]^{\mathrm{H}} \tag{8.13.36}$$

则 $x(0),x(1),\cdots,x(N-1)$ 的离散 Fourier 变换即信号的频谱为

$$X(\omega)=\sum_{k=0}^{N-1}x(k)\mathrm{e}^{-\mathrm{j}\,k\omega}=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} \tag{8.13.37}$$

由于信号的功率谱 $P(\omega)$ 定义为频谱模值的平方，故

$$P(\omega)=|X(\omega)|^2=|\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}|^2=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\left(\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\right)\boldsymbol{w}=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{w} \tag{8.13.38}$$

式中，$N\times N$ 矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}$ 是自相关矩阵 $\boldsymbol{R}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\}$ 的瞬时估计。令 $\hat{\boldsymbol{R}}$ 的特征值分解为

$$\hat{\boldsymbol{R}}=\sum_{k=1}^{N}\lambda_k\boldsymbol{u}_k\boldsymbol{u}_k^{\mathrm{H}} \tag{8.13.39}$$

式中，$\lambda_1\geqslant\lambda_2\geqslant\cdots\geqslant\lambda_N$。于是，式 (8.13.38) 定义的功率谱可以写作

$$P(\omega)=\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{w}=\sum_{k=1}^{N}\lambda_k|\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_k|^2\geqslant 0 \tag{8.13.40}$$

因为特征值 $\lambda_i\geqslant 0$。

由于 Fourier 向量的元素以角频率 ω 为变量，功率谱 $P(\omega)$ 取连续函数形式。此时，Rayleigh 商为

$$\lambda_N\leqslant\frac{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{w}}{\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{w}}\leqslant\lambda_1 \tag{8.13.41}$$

注意，对于 $N\times 1$ 维 Fourier 向量 $\boldsymbol{w}$，有 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{w}=N$。将这以一结果代入式 (8.13.41)，立即有

$$N\lambda_N\leqslant P(\omega)\leqslant N\lambda_1 \tag{8.13.42}$$

从以上分析可以得出功率谱分析的以下结论：

(1) 由于 Rayleigh 商的性质，功率谱 $P(\omega)$ 的取值位于区间 $[N\lambda_N,N\lambda_1]$。

(2) 当 Fourier 向量碰巧是 $\hat{\boldsymbol{R}}$ 的一个特征向量，并且对应的特征值非零时，功率谱 $P(\omega)$ 取极大值即峰值。

应当指出，对于一般的随机信号，Fourier 向量不会碰巧与信号相关矩阵的特征向量一致。然而，对于等距离布置的直线阵列，这一情况是会发生的。此时，各个阵元观测信号的空间自相关矩阵是 Hermitian 矩阵，其理想的特征向量取 Fourier 向量的形式。对此感兴趣的读者可进一步参考文献 [239]。

本章小结

矩阵的特征分析包含了丰富多彩的内容。不仅标准的特征值分解有许多有趣的性质和广泛的应用，而且它还有各类既有趣，又极为重要的推广：广义特征值分解、Rayleigh 商、广义 Rayleigh 商、二次特征值和多个矩阵的联合对角化，它们之间有以下关系。

(1) 对称的正定矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的广义特征值分解等价为 $\boldsymbol{AB}^{-1}$ 的特征值分解；

(2) 满足对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Rayleigh 商 $\lambda = \dfrac{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}}$ 的极小值和极大值的解 $(\lambda, \boldsymbol{u})$ 分别是与 $\boldsymbol{A}$ 的最小和最大的特征值对应的特征对；

(3) 满足对称矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的广义 Rayleigh 商 $\lambda = \dfrac{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u}}$ 的极小值和极大值的解 $(\lambda, \boldsymbol{u})$ 分别是与矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的最小和最大的广义特征值对应的广义特征对；

(4) 二次特征值问题通过线性化，可以转换为标准的特征值问题求解；

(5) 两个对称矩阵的联合对角化等同于这两个矩阵组成的矩阵束的广义特征值分解。

围绕这些推广的特征值分解，本章分别列举了一些典型的应用例子。

最后，本章还讨论了特征分析与 Fourier 分析之间的关系。

习 题

8.1 证明当 $\boldsymbol{A}$ 为幂等矩阵时，矩阵 $\boldsymbol{BA}$ 的特征值与 $\boldsymbol{ABA}$ 的特征值相同。

8.2 设 n 阶矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的全部元素为 1，求 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个特征值。

8.3 设矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & y & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

(1) 已知 $\boldsymbol{A}$ 的一个特征值为 3，试求 y 值。

(2) 求矩阵 $\boldsymbol{P}$，使 $(\boldsymbol{AP})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AP}$ 为对角矩阵。

8.4 令初始值 $u(0) = 2, v(0) = 8$。利用特征值求解微分方程

$$u'(t) = 3u(t) + v(t)$$

$$v'(t) = -2u(t) + v(t)$$

8.5 令 4×4 维 Hessenberg 矩阵

$$\boldsymbol{H} = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & c_1 & d_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 & d_2 \\ 0 & b_3 & c_3 & d_3 \\ 0 & 0 & c_4 & d_4 \end{bmatrix}$$

证明以下两个结果:

(1) 若 a_2, b_3, c_4 均不等于零，并且 $\boldsymbol{H}$ 的任意特征值 λ 为实数，则 λ 的几何多重度必定等于 1。

(2) 若 $\boldsymbol{H}$ 与对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 相似，并且 $\boldsymbol{A}$ 的某个特征值 λ 的代数多重度大于 1，则 a_2, b_3, c_4 至少有一个等于零。

8.6 证明以下各题:

(1) 若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{A}^{\rm H} \in C^{n\times n}$，并且 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = r < n$，则存在 $n \times n$ 酉矩阵 $\boldsymbol{V}$，使得

$$\boldsymbol{V}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \text{diag}(\boldsymbol{I}_r, \boldsymbol{0})$$

(2) 若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^{\rm H} \in C^{n\times n}$，并且 $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{I}_n$，则存在酉矩阵 $\boldsymbol{V}$，使得

$$\boldsymbol{V}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{V} = \text{diag}(\boldsymbol{I}_r, \boldsymbol{I}_{n-r})$$

8.7 令 $\boldsymbol{H} = \boldsymbol{I} - 2\boldsymbol{u}\boldsymbol{u}^{\rm H}$ 为 Householder 变换矩阵。

(1) 证明：具有单位范数的向量 $\boldsymbol{u}$ 是 Householder 变换矩阵的特征向量，并求与之相对应的特征值。

(2) 若向量 $\boldsymbol{w}$ 与 $\boldsymbol{u}$ 正交，证明 $\boldsymbol{w}$ 是矩阵 $\boldsymbol{H}$ 的特征向量，并求与之对应的特征向量。

8.8 设矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 相似，其中

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 2 & x & 2 \\ 3 & 1 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & y \end{bmatrix}$$

(1) 求 x 和 y 的值。

(2) 求可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$，使得 $\boldsymbol{P}^{\rm T}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{B}$。

8.9 利用分块矩阵，可以将矩阵的特征值问题降维。令

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{B} & \boldsymbol{X} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{C} \end{bmatrix} \quad (\boldsymbol{O}\text{ 为零矩阵})$$

证明 $\det(\boldsymbol{A} - \lambda\boldsymbol{I}) = \det(\boldsymbol{B} - \lambda\boldsymbol{I})\det(\boldsymbol{C} - \lambda\boldsymbol{I})$。

8.10 令 $\boldsymbol{u}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ 对应的一个特征向量。

(1) 证明 $\boldsymbol{u}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A} - 3\boldsymbol{I}$ 的一个特征向量。

(2) 证明 $\boldsymbol{u}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}^2 - 4\boldsymbol{A} + 3\boldsymbol{I}$ 的一个特征向量。

8.11 [236] 令

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -2 & 4 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 5 & 2 \end{bmatrix}, \qquad f(x) = x^{593} - 2x^{15}$$

证明

$$\boldsymbol{A}^{593} - 2\boldsymbol{A}^{15} = -\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & -4 & -3 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & -5 & -2 \end{bmatrix}$$

8.12 [236] 假定 $a_0, a_1, a_2, \cdots$ 为正整数序列，并且满足递推关系 $a_{k+1} = a_k + 2a_{k-1}, \forall k \geqslant 1$。若 $a_0 = 0$, $a_1 = 1$，求 a_k 值。（提示：建立向量 $\begin{bmatrix} a_{k+1} \\ a_k \end{bmatrix}$ 与 $\begin{bmatrix} a_1 \\ a_0 \end{bmatrix}$ 之间的关系，并运用 Cayley-Hamilton 定理。）

8.13 已知矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

求 $\mathrm{e}^{\boldsymbol{A}t}$。

8.14 [236] 已知矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 2 \\ -1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 3 \end{bmatrix}$$

求非奇异矩阵 $\boldsymbol{S}$ 使相似矩阵 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 为对角矩阵。

8.15 证明：满足 $\boldsymbol{A}^2 - \boldsymbol{A} = 2\boldsymbol{I}$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 是可对角化的。

8.16 已知 $\boldsymbol{u} = [1, 1, -1]^{\mathrm{T}}$ 是矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & 2 \\ 5 & a & 3 \\ -1 & b & -2 \end{bmatrix}$$

的一个特征向量。

(1) 求 a, b 和特征向量 $\boldsymbol{u}$ 对应的特征值。

(2) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 能否相似于对角矩阵？试说明理由。

8.17 证明：矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的 Kronecker 积 $\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B}$ 的非零特征值等于 $\boldsymbol{A}$ 的特征值与 $\boldsymbol{B}$ 的特征值的乘积，即 $\lambda(\boldsymbol{A} \otimes \boldsymbol{B}) = \lambda(\boldsymbol{A})\lambda(\boldsymbol{B})$。

8.18 令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 均为 Hermitian 矩阵，并且 λ_i 和 μ_i 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的特征值。证明：若 $c_1\boldsymbol{A} + c_2\boldsymbol{B}$ 具有特征值 $c_1\lambda_i + c_2\mu_i$，其中，c_1, c_2 为任意标量，则 $\boldsymbol{AB} = \boldsymbol{BA}$。

8.19 证明：若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{C}$ 正定，则 $|\boldsymbol{A}\lambda^2 + \boldsymbol{B}\lambda + \boldsymbol{C}| = 0$ 的根具有负的实部。

8.20 令 $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{Q}, \boldsymbol{R}, \boldsymbol{X}$ 为 2×2 矩阵。证明：矩阵方程 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{X}^2 + \boldsymbol{Q}\boldsymbol{X} + \boldsymbol{R} = \boldsymbol{O}$（零矩阵）的解 $\boldsymbol{X}$ 的每一个特征值都是 $|\boldsymbol{P}\lambda^2 + \boldsymbol{Q}\lambda + \boldsymbol{C}| = 0$ 的根。

8.21 令

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \qquad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$$

若定义矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的广义特征值 (α, β_i) 是满足 $\det(\beta\boldsymbol{A} - \alpha\boldsymbol{B}) = 0$ 的数值 α 和 β，试求 α 和 β。

8.22 [397, p.286] 令矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的广义特征值 (α, β) 如上题所定义。令 $\lambda_i = (\alpha_i, \beta_i)$ 和 $\lambda_j = (\alpha_j, \beta_j)$ 是矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的两个不同广义特征值，并且 $\boldsymbol{u}_i$ 是与广义特征值 λ_i 对应的右广义特征向量，而 $\boldsymbol{w}_j$ 是与 λ_j 对应的左广义特征向量，证明

$$\langle \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{w}_j \rangle = \langle \boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_i, \boldsymbol{w}_j \rangle = 0$$

8.23 令矩阵 $\boldsymbol{G}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的广义逆矩阵，并且 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{GA}$ 都是对称矩阵。证明 $\boldsymbol{A}$ 的非零特征值的倒数是广义逆矩阵 $\boldsymbol{G}$ 的一个特征值。

8.24 [36, p.226] 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n \times n$ 复矩阵，其特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$。证明 $\boldsymbol{A}$ 为正规矩阵，当且仅当下列条件之一成立：

(1) $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{H}}$ 的特征值为 $|\lambda_1|^2, |\lambda_2|^2, \cdots, |\lambda_n|^2$。

(2) $\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的特征值为 $\lambda_1 + \lambda_1^*, \lambda_2 + \lambda_2^*, \cdots, \lambda_n + \lambda_n^*$。

8.25 利用特征方程证明：若 λ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，则 $\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}^{-1}$ 的特征值等于或大于 2。

8.26 令矩阵 $\boldsymbol{A}_{4\times 4}$ 满足 $\boldsymbol{AA}^{\mathrm{T}} = 2\boldsymbol{I}$，且 $|\boldsymbol{A}| < 0$，求伴随矩阵 $\mathrm{adj}(\boldsymbol{A})$ 的一个特征值。

8.27 设 $\boldsymbol{A}_{4\times 4}$ 满足条件 $|3\boldsymbol{I}_4 + \boldsymbol{A}| = 0, \boldsymbol{AA}^{\mathrm{T}} = 2\boldsymbol{I}_4$ 和 $|\boldsymbol{A}| < 0$。求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的伴随矩阵 $\mathrm{adj}(\boldsymbol{A}) = \det(\boldsymbol{A})\boldsymbol{A}^{-1}$ 的一个特征值。

8.28 证明二次型 $f = \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Ax}$ 在 $\|\boldsymbol{x}\| = 1$ 时的最大值等于对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的最大特征值。（提示：将 f 化为标准二次型。）

8.29 证明：若 λ 是矩阵 $\boldsymbol{AB}$ 的一个特征值，则它也是矩阵 $\boldsymbol{BA}$ 的特征值 ($\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 不一定为正方矩阵，但 $\boldsymbol{AB}$ 和 $\boldsymbol{BA}$ 分别是正方的)。

8.30 令 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 为对称矩阵，其特征值为 $\lambda_i, i = 1, 2, \cdots, n$。证明

$$\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n} a_{ij}^2 = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k^2$$

8.31 设 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 的全部特征值为 $\lambda_1, \lambda_2, \cdots, \lambda_n$，且与 λ_i 对应的特征向量为 $\boldsymbol{u}_i$。试求

(1) $\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{AP}$ 的特征值与相对应的特征向量。

(2) $(\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{AP})^{\mathrm{T}}$ 的特征值与相对应的特征向量。

8.32 设 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A} = \{a_{ij}\}$，其中

$$a_{ij} = \begin{cases} a, & i = j \\ b, & i \neq j \end{cases}$$

求 $\boldsymbol{A}$ 的特征值及特征向量。

8.33 令 $p(z) = a_0 + a_1 z + \cdots + a_n z^n$ 为一多项式。证明：矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量一定是矩阵多项式 $p(\boldsymbol{A})$ 的特征向量，但 $p(\boldsymbol{A})$ 的特征向量不一定是 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量。

8.34 令 $\boldsymbol{A}$ 为实斜对称矩阵，即其元素 $a_{ij} = -a_{ji}$。证明：

(1) $\boldsymbol{A}$ 的特征值为纯虚数或零。

(2) 若 $\boldsymbol{u} + \mathrm{j}\boldsymbol{v}$ 是与特征值 $\mathrm{j}\mu$ (其中，μ 是非零的实数) 对应的特征向量，并且 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 为实向量，则 $\boldsymbol{u}$ 与 $\boldsymbol{v}$ 正交。

8.35 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个正交矩阵，λ 是 $\boldsymbol{A}$ 的一个不等于 ± 1，但其模为 1 的特征值，并且 $\boldsymbol{u} + \mathrm{j}\boldsymbol{v}$ 是与该特征值对应的特征向量，其中，$\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 为实向量。证明 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$ 正交。

8.36 一滤波器的抽头延迟线的输出由

$$y(k) = \boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}(k)$$

给出，式中

$$\boldsymbol{a}=[a_0,a_1,\cdots,a_n]^{\mathrm{T}}$$
$$\boldsymbol{x}(k)=[x(k),x(k-1),\cdots,x(k-n)]^{\mathrm{T}}$$

令

$$\boldsymbol{R}_x\overset{\text{def}}{=}\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$$

式中

$$\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\lambda_0,\lambda_1,\cdots,\lambda_n)$$

如果输出序列 $\{y(k)\}$ 的均方值为

$$J_a=\frac{1}{2}\mathrm{E}\{y^2(k)\}$$

证明以下两个结论：

(1) 在条件 $\boldsymbol{a}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}=1$ 的约束下，使 J_a 最小化等价于

$$J_w=\frac{1}{2}\sum_{i=0}^{n}w_i^2\lambda_i$$

的最小化，其中

$$\boldsymbol{w}=[w_0,w_1,\cdots,w_n]^{\mathrm{T}},\quad \sum_{i=0}^{n}w_i^2=1$$

且 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{a}$。

(2) 若取 $\boldsymbol{w}=[\pm1,0,\cdots,0]^{\mathrm{T}}$，则使 J_a 最小化的最优向量 $\boldsymbol{a}=\pm\boldsymbol{a}_0$，其中，$\boldsymbol{a}_0$ 是矩阵 $\boldsymbol{R}_x$ 相对于最小特征值 λ_0 的特征向量。

8.37 证明：一个 $n\times n$ 实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以写作

$$\boldsymbol{A}=\sum_{i=1}^{n}\lambda_i\boldsymbol{Q}_i$$

式中，λ_i 是 $\boldsymbol{A}$ 的特征值；$\boldsymbol{Q}_i$ 为非负定矩阵，并且不仅满足正交条件

$$\boldsymbol{Q}_i\boldsymbol{Q}_j=\boldsymbol{O},\quad i\neq j$$

而且还是幂等矩阵，即 $\boldsymbol{Q}_i^2=\boldsymbol{Q}_i$。矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的这一表示称为 $\boldsymbol{A}$ 的谱分解 [36, p.64]。

8.38 已知

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}3&-1&0\\0&5&-2\\0&0&9\end{bmatrix}$$

求非奇异矩阵 $\boldsymbol{S}$ 使得相似变换 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{B}$ 为对角矩阵，并求对角矩阵 $\boldsymbol{B}$。

8.39 已知矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0&0&1\\x&1&y\\1&0&0\end{bmatrix}$$

有三个线性无关的特征向量，求 x 和 y 应该满足的条件。

8.40 设

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & -1\\ 1 & 1\end{bmatrix}$$

试通过求矩阵 $\boldsymbol{S}$ 使得 $\boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{D}$ (对角矩阵)，证明 $\boldsymbol{A}$ 是可对角化的。

8.41 证明下列结论：

(1) 若 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 与同一特征值 λ 对应的特征向量，则 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p$ 的任意一个线性组合也是 $\boldsymbol{A}$ 的属于特征值 λ 的特征向量。

(2) 若 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 与不同特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_p$ 对应的特征向量，则当 $c_1,c_2,\cdots,c_p$ 中至少有两个不为零时，$c_1\boldsymbol{u}_1+c_2\boldsymbol{u}_2+\cdots+c_p\boldsymbol{u}_p$ 必定不是 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量。

8.42 设三阶实对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值为 $\lambda_1=-1,\lambda_2=1,\lambda_3=-2$，且与 λ_1 对应的特征向量为 $\boldsymbol{u}_1=[0,1,1]^{\mathrm{T}}$，求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的表达式。

8.43 已知矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & -1 & 1\\ x & 4 & y\\ -3 & -3 & 5\end{bmatrix}$$

有三个线性无关的特征向量，且 $\lambda=2$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的二重特征值。试求可逆矩阵 $\boldsymbol{P}$，使得 $\boldsymbol{P}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{P}$ 为对角矩阵。

8.44 设向量 $\boldsymbol{\alpha}=[\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n]^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{\beta}=[\beta_1,\beta_2,\cdots,\beta_n]^{\mathrm{T}}$ 是两个正交的非零向量。若令 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{T}}$，试求

(1) $\boldsymbol{A}^2$；

(2) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值和特征向量。

8.45 已知矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & 0 & 1\\ 0 & 2 & 0\\ 1 & 0 & 1\end{bmatrix}$$

且 $\boldsymbol{B}=(k\boldsymbol{I}+\boldsymbol{A})^2$，其中，$k$ 为实数。

(1) 求矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的对角化矩阵 $\boldsymbol{\Lambda}$。

(2) 试问：k 为何值时，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 是正定的？

8.46 设

$$|\boldsymbol{A}|=\begin{vmatrix}a & -1 & c\\ 5 & b & 3\\ 1-c & 0 & -a\end{vmatrix}=-1$$

又 $\boldsymbol{A}$ 的伴随矩阵 $\mathrm{adj}(\boldsymbol{A})=|\boldsymbol{A}|\boldsymbol{A}^{-1}$ 有一个特征值为 λ，与之对应的特征向量 $\boldsymbol{u}=[-1,-1,1]^{\mathrm{T}}$。求 a,b,c 和 λ 的值。

8.47 求矩阵

$$\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1 & -1 & -1 & -1\\ -1 & 1 & -1 & -1\\ -1 & -1 & 1 & -1\\ -1 & -1 & -1 & 1\end{bmatrix}$$

的正交基。

8.48 求解广义特征值问题 $\boldsymbol{Ax} = \lambda \boldsymbol{Bx}$ 时，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 必须是非奇异的。现在假定 $\boldsymbol{B}$ 奇异，其广义逆矩阵为 $\boldsymbol{B}^\dagger$。

(1) 令 $(\lambda, \boldsymbol{x})$ 是矩阵 $\boldsymbol{B}^\dagger \boldsymbol{A}$ 的一个特征对。证明，该特征对是矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 的一个广义特征对，若 $\boldsymbol{Ax}$ 是矩阵 $\boldsymbol{B}^\dagger \boldsymbol{B}$ 与特征值 1 对应的特征向量。

(2) 令 $\lambda, \boldsymbol{x}$ 满足 $\boldsymbol{Ax} = \lambda \boldsymbol{Bx}$。证明：若 $\boldsymbol{x}$ 也是矩阵 $\boldsymbol{B}^\dagger \boldsymbol{B}$ 与特征值 1 对应的特征向量，则 $(\lambda, \boldsymbol{x})$ 是矩阵 $\boldsymbol{B}^\dagger \boldsymbol{A}$ 的一个特征对。

8.49 令矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 与广义特征值 λ_1 对应的右特征向量为 $\boldsymbol{u}_1$，左特征向量为 $\boldsymbol{v}_1$，并且 $\langle \boldsymbol{Bu}_1, \boldsymbol{Bv}_1 \rangle = 1$。试证明：矩阵束 $(\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B})$ 和

$$\boldsymbol{A}_1 = \boldsymbol{A} - \sigma_1 \boldsymbol{B}\boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}} \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}, \qquad \boldsymbol{B}_1 = \boldsymbol{B} - \sigma_2 \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_1 \boldsymbol{v}_1^{\mathrm{H}} \boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}$$

具有相同的左和右特征向量。式中，假定移位因子 σ_1 和 σ_2 满足条件 $1 - \sigma_1\sigma_2 \neq 0$。

8.50 考虑无线通信中的一个码分多址 (CDMA) 系统，它共有 K 个用户 [450]。其中，用户 1 为期望用户。一接收机接收所有 K 个用户发射的信号，其接收信号的向量形式由下式给出：

$$\boldsymbol{y}(n) = \sum_{k=1}^{K} \boldsymbol{y}_k(n) = \boldsymbol{h}_1 w_1(n) + \boldsymbol{H}\boldsymbol{w}(n) + \boldsymbol{v}(n)$$

式中，$w_1(n)$ 是期望用户发射的比特信号，它是我们希望检测的；$\boldsymbol{h}_1$ 是期望用户的等价特征波形向量，它是已知的；而 $\boldsymbol{H}$ 和 $\boldsymbol{w}(n)$ 分别为所有其他用户 (简称干扰用户) 的特征波形向量组成的矩阵和干扰比特向量。假定信道的加性噪声为高斯白噪声，各个噪声分量的均值都等于零，方差均为 σ^2。

(1) 设计一最小方差接收机 $\boldsymbol{f}$，使得接收机输出

$$\hat{w}_1(n) = \boldsymbol{f}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y}(n)$$

能够在满足约束条件

$$\boldsymbol{f}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{h}_1 = 1$$

的同时，与 $w_1(n)$ 之间的均方误差为最小。求最小方差接收机 $\boldsymbol{f}$ 的表达式。

(2) 若期望用户的等价特征波形向量 $\boldsymbol{h}_1$ 为

$$\boldsymbol{h}_1 = \boldsymbol{C}_1 \boldsymbol{g}_1$$

式中

$$\boldsymbol{C}_1 = \begin{bmatrix} c_1(0) & & 0 \\ \vdots & \ddots & \\ c_1(P-1) & \cdots & c_1(0) \\ & \ddots & \vdots \\ 0 & & c_1(P-1) \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{g}_1 = \begin{bmatrix} g_1(0) \\ \vdots \\ g_1(L) \end{bmatrix}$$

这里，$c_1(0), c_1(1), \cdots, c_1(P-1)$ 是期望用户的扩频码，而 $g_1(l)$ 代表第 l 条传输路径的参数。试设计一最小方差无畸变 (MVDR) 波束形成器 $\boldsymbol{g}$，并证明它恰好是矩阵束 $(\boldsymbol{C}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{R}_y\boldsymbol{C}_1, \boldsymbol{C}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_1)$ 与最小广义特征值对应的广义特征向量。

8.51 假定

$$\begin{bmatrix} \boldsymbol{O} & \boldsymbol{A} \\ \boldsymbol{A}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{z} \end{bmatrix} = \lambda \begin{bmatrix} \boldsymbol{B}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{B}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{y} \\ \boldsymbol{z} \end{bmatrix}$$

式中，$\boldsymbol{A} \in R^{m\times n}, \boldsymbol{B}_1 \in R^{m\times m}$，$\boldsymbol{B}_2 \in R^{n\times n}$。假定矩阵 $\boldsymbol{B}_1$ 和 $\boldsymbol{B}_2$ 正定，并且分别具有 Cholesky 三角因子 $\boldsymbol{G}_1$ 和 $\boldsymbol{G}_2$。将上式描述的广义特征值问题与 $\boldsymbol{G}_1^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{G}_2^{-\mathrm{T}}$ 联系起来。

8.52 已知矩阵

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} &= \omega x(t) + 0y(t) + 0z(t) \\ \frac{\mathrm{d}y(t)}{\mathrm{d}t} &= 0x(t) + \omega y(t) + z(t) \\ \frac{\mathrm{d}z(t)}{\mathrm{d}t} &= 0x(t) + y(t) + \omega z(t) \end{aligned}$$

求三阶矩阵微分方程

$$\boldsymbol{\Phi}^{(n)}(t) + c_2\boldsymbol{\Phi}''(t) + c_1\boldsymbol{\Phi}'(t) + c_0\boldsymbol{\Phi}(t) = \boldsymbol{O}$$

满足初始条件

$$\boldsymbol{\Phi}(0) = \boldsymbol{I}, \quad \boldsymbol{\Phi}'(0) = \boldsymbol{A}, \quad \boldsymbol{\Phi}''(0) = \boldsymbol{A}^2$$

的解 $\boldsymbol{\Phi}(t)$。

8.53 若 $\boldsymbol{M}, \boldsymbol{C}, \boldsymbol{K}$ 对称和正定，证明

$$|\lambda^2\boldsymbol{M} + \lambda\boldsymbol{C} + \boldsymbol{K}| = 0$$

的根有负的实部。

8.54 已知 $m \times m$ 矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & -1 & & & \\ -1 & 2 & -1 & & \\ & & \ddots & & \\ & & -1 & 2 & -1 \\ & & & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

证明

$$|\lambda\boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}| = \prod_{i=1}^{m}\left(\lambda - 2 - 2\cos\frac{2i\pi}{2m-1}\right)$$

8.55 假定 $n \times n$ 维 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值按照顺序 $\lambda_1(\boldsymbol{A}) \geqslant \lambda_2(\boldsymbol{A}) \geqslant \cdots \geqslant \lambda_n(\boldsymbol{A})$ 排列。用 Rayleigh 商证明：

(1) $\lambda_1(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \geqslant \lambda_1(\boldsymbol{A}) + \lambda_n(\boldsymbol{B})$。

(2) 若 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}$ 正定，则 $\lambda_n(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}) \geqslant \lambda_n(\boldsymbol{A}) + \lambda_n(\boldsymbol{B})$。

8.56 利用 Rayleigh 商证明：对于任何一个 $n\times n$ 对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和任何一个 $n\times n$ 半正定矩阵 $\boldsymbol{B}$，特征值服从不等式

$$\lambda_k(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant\lambda_k(\boldsymbol{A}),\quad k=1,2,\cdots,n$$

若 $\boldsymbol{B}$ 正定，则

$$\lambda_k(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})>\lambda_k(\boldsymbol{A}),\quad k=1,2,\cdots,n$$

8.57 令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别是 $n\times n$ 对称矩阵，证明

$$\lambda_1(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant\lambda_1(\boldsymbol{A})+\lambda_1(\boldsymbol{B})$$

和

$$\lambda_n(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\leqslant\lambda_n(\boldsymbol{A})+\lambda_n(\boldsymbol{B})$$

8.58 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 矩阵 (不一定对称)。证明对任意 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$，恒有不等式

$$(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^2\leqslant(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})$$

和

$$\frac{1}{2}\left|\frac{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\right|\leqslant\left(\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\right)^{1/2}$$

8.59 考虑对称矩阵序列

$$\boldsymbol{A}_r=[a_{ij}],\qquad i,j=1,2,\cdots,r$$

其中，$r=1,2,\cdots,n$。令 $\lambda_i(\boldsymbol{A}_r)$, $i=1,2,\cdots,r$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}_r$ 的第 i 个特征值，并且

$$\lambda_1(\boldsymbol{A}_r)\geqslant\lambda_2(\boldsymbol{A}_r)\geqslant\cdots\geqslant\lambda_r(\boldsymbol{A}_r)$$

则

$$\lambda_{k+1}(\boldsymbol{A}_{i+1})\leqslant\lambda_k(\boldsymbol{A}_i)\leqslant\lambda_k(\boldsymbol{A}_{i+1})$$

这一结果称为 Sturmian 分离定理 [36, p.117]。试使用 Rayleigh 商证明这一定理。

8.60 证明式 (8.11.1) 是双曲线二次特征值问题，当且仅当 $\boldsymbol{Q}(\lambda)$ 对所有实特征值 $\lambda\in\boldsymbol{R}$ 负定。

8.61 对于两个相同维数的任意正方矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$，证明

(1) $2(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})-(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}}$ 半正定。

(2) $\mathrm{tr}[(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}}]\leqslant 2[\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})+\mathrm{tr}(\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})]$。

(3) $\lambda[(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})^{\mathrm{T}}]\leqslant 2[\lambda(\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})+\lambda(\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}})]$。

8.62 令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个维数相同的半正定矩阵，证明 [490],[329]

$$\sqrt{\mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{B})}\leqslant\frac{1}{2}[\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})+\mathrm{tr}(\boldsymbol{B})]$$

等号成立，当且仅当 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$ 和 $\text{rank}(\boldsymbol{A})\leqslant 1$。

8.63 对于多项式 $p(x)=x^n+a_{n-1}x^{n-1}+\cdots+a_1x+a_0$，称 $n\times n$ 矩阵

$$\boldsymbol{C}_p=\begin{bmatrix}0 & 1 & 0 & \cdots & 0\\ 0 & 0 & 1 & \cdots & 0\\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots\\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 1\\ -a_0 & -a_1 & -a_2 & \cdots & -a_{n-1}\end{bmatrix}$$

为多项式 $p(x)$ 的友矩阵。利用数学归纳法证明：对于 $n\geqslant 2$，恒有

$$\det(\boldsymbol{C}_p-\lambda\boldsymbol{I})=(-1)^n(a_0+a_1\lambda+\cdots+a_{n-1}\lambda^{n-1}+\lambda^n)=(-1)^np(\lambda)$$

8.64 令 $p(x)=x^3+a_2x^2+a_1x+a_0$，并且 λ 是多项式 $p(x)$ 的一个零点。

(1) 写出多项式 $p(x)$ 的友矩阵 $\boldsymbol{C}_p$。

(2) 解释为什么 $\lambda^3=-a_2\lambda^2-a_1\lambda-a_0$，并证明 $(1,\lambda,\lambda^2)$ 是多项式 $p(x)$ 的友矩阵 $\boldsymbol{C}_p$ 的特征值。

8.65 [314] 令 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{A}-\boldsymbol{B}$ 为半正定矩阵。证明：$\boldsymbol{B}^\dagger-\boldsymbol{A}^\dagger$ 是半正定的，当且仅当 $\text{rank}(\boldsymbol{A})=\text{rank}(\boldsymbol{B})$。

8.66 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 矩阵 (不一定对称)。证明：对于每一个 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$，恒有

$$(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})^2\leqslant(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x})$$

因此有

$$\frac{1}{2}\left|\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\right|\leqslant\left(\frac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}}\right)^{1/2}$$

8.67 证明：对于任何一个 $n\times n$ 对称矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和任何一个半正定矩阵 $\boldsymbol{B}$，恒有特征值不等式

$$\lambda_k(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})\geqslant\lambda_k(\boldsymbol{A}),\qquad k=1,2,\cdots,n$$

并且若 $\boldsymbol{B}$ 正定，则有

$$\lambda_k(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B})>\lambda_k(\boldsymbol{A}),\qquad k=1,2,\cdots,n$$

(提示：利用 Rayleigh 商的极大 - 极小原理。)

8.68 [296] 令 $\boldsymbol{A}$ 是 $n\times n$ 正定矩阵，其特征值 $0<\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n$。证明：矩阵

$$(\lambda_1+\lambda_n)\boldsymbol{I}_n-\boldsymbol{A}-(\lambda_1\lambda_n)\boldsymbol{A}^{-1}$$

半正定，并且其秩 $\leqslant n-2$。 (提示：利用 $x^2-(a+b)x+ab\leqslant 0,\forall x\in[a,b]$。)

8.69 [296] 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $n\times n$ 正定矩阵，其特征值 $0<\lambda_1\leqslant\lambda_2\leqslant\cdots\leqslant\lambda_n$。利用上一习题证明

$$1\leqslant(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x})(\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}^{-1}\boldsymbol{x})\leqslant\frac{(\lambda_1+\lambda_n)}{4\lambda_1\lambda_n}$$

对所有满足 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{x}=1$ 的实向量 $\boldsymbol{x}$ 成立。这一不等式称为 Kantorovich 不等式 [244]。

第 9 章　子空间分析与跟踪

在涉及逼近、最优化、微分方程、通信、信号处理、系统科学等问题中，子空间起着非常重要的作用。向量子空间的框架可以帮助我们回答一些重要问题：例如，怎样才能对复杂函数获得一个好的多项式逼近？如何求微分方程好的逼近解？怎样设计一个更好的信号处理器？诸如此类的问题实际上是许多工程应用的核心问题。向量子空间为解决这些问题提供了一类有效的方法 —— 子空间方法。

本章将围绕子空间方法，讨论子空间的分析理论，介绍子空间方法的一些典型应用。在很多比较复杂的工程问题中，子空间是时变的，而我们又需要对接收信号作实时处理，或者对系统进行实时控制。在这些场合，需要对子空间进行跟踪。因此，本章还将重点讨论如何对子空间进行跟踪与更新。

9.1　子空间的一般理论

在具体讨论各种子空间之前，有必要先介绍子空间的一般理论：子空间的基本概念、子空间之间的代数关系和几何关系等。

9.1.1　子空间的基

n 维复向量空间 C^n 是所有 n 维复向量的集合。令 $m < n$，则 m 个 n 维复向量的子集合便构成 C^n 内的一个向量子空间。更具体地，有下面的数学定义。

定义 9.1.1　若 $S = \{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$ 是向量空间 V 的向量子集合，则 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m$ 的所有线性组合的集合 W 称为由 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m$ 张成的子空间，定义为

$$W = \text{Span}\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m\} = \{\boldsymbol{u}:\ \boldsymbol{u} = a_1\boldsymbol{u}_1 + a_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + a_m\boldsymbol{u}_m\} \tag{9.1.1}$$

张成子空间 W 的每个向量称为 W 的生成元 (generator)，而所有生成元组成的集合 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$ 称为子空间的张成集 (spanning set)。一个只包含了零向量的向量子空间称为平凡子空间 (trivial subspace)。

定理 9.1.1　(张成集定理 (spanning set theorem)) [274, p.234]

令 $S = \{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$ 是向量空间 V 的一集合，并且 $W = \text{Span}\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$ 是由 S 的 m 个列向量张成的子空间。

(1) 如果 S 内有某个向量 (例如 $\boldsymbol{u}_k$) 是其他向量的线性组合，则从 S 中删去向量 $\boldsymbol{u}_k$ 后，其他向量仍然张成子空间 W。

(2) 若 $H \neq \{\mathbf{0}\}$ 即 H 为非平凡子空间，则在 S 内一定存在某个由线性无关的向量组成的子集合，它张成子空间 W。

证明　(1) 由于子空间的生成只与张成集的向量有关，与它们的排列顺序无关，故不失一般性，可以假定 S 内的向量经过排列，使得向量 $\boldsymbol{u}_m$ 是 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_{m-1}$ 的线性组合，即

$$\boldsymbol{u}_m = a_1\boldsymbol{u}_1 + a_2\boldsymbol{u}_2 + \cdots + a_{m-1}\boldsymbol{u}_{m-1}$$

若 $\boldsymbol{x}$ 为子空间 W 内的某个向量，则对合适的标量 $c_1, c_2, \cdots, c_m$，可以将 $\boldsymbol{x}$ 写作

$$\boldsymbol{x} = c_1\boldsymbol{u}_1 + c_2\boldsymbol{u}_2 + c_{m-1}\boldsymbol{u}_{m-1} + c_m\boldsymbol{u}_m$$

将 $\boldsymbol{u}_m$ 的线性组合表达式代入上式，容易看出 $\boldsymbol{x}$ 是 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_{m-1}$ 的线性组合。因此，在删去 $\boldsymbol{u}_m$ 后，向量子集合 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_{m-1}\}$ 仍然张成子空间 W，因为 $\boldsymbol{x}$ 是 W 的一任意元素。

(2) 如果 S 内仍然存在与其他向量线性相关的向量，则可以继续删去该向量，一直到删去所有与其他向量线性相关的向量为止。然而，由于 $H \neq \{\mathbf{0}\}$，所以在 S 内至少会剩下一个非零向量不至于被删去。换言之，张成集一定存在。 ■

假定从向量集合 $S = \{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$ 中删去与其他向量线性相关的所有多余向量后，剩下 p 个线性无关的向量 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\}$，它们仍然张成子空间 W。在张成同一子空间 W 的意义上，称 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\}$ 和 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_m\}$ 为等价张成集 (equivalent spanning sets)。由此可引出子空间的基的概念。

定义 9.1.2　令 W 是一向量子空间。向量集合 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\}$ 称为 W 的一组基，若下列两个条件满足：

(1) 子空间 W 由向量 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p$ 张成，即

$$H = \mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\}$$

(2) 向量集合 $B = \{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\}$ 是一线性无关的集合。

定理 9.1.1 的 (1) 给出了从子空间 W 的张成集 S 构造 W 的基的原则：删去所有与其他向量线性有关的向量；定理的 (2) 则保证了非平凡子空间 W 的基的存在性。

关于子空间的基，有以下两点重要的观察：

(1) 当使用张成集定理从向量集合 S 中删去向量时，一旦 S 变成线性无关向量的集合，则必须立即停止从 S 内再删除向量。如果删去不是其他剩余向量的线性组合的额外向量，则较小的向量集合将不再张成子空间 W。因此，子空间的一组基是一个尽可能小的张成集。换句话说，张成子空间 W 的基向量一个也不能少。

(2) 一组基也是线性无关向量的尽可能大的集合。令 S 是子空间 W 的一组基，如果从子空间 W 内，给 S 再扩大一个向量 (例如 $\boldsymbol{w}$)，则新的向量集合不可能是线性无关的，因为 S 张成子空间 W，并且 W 内的向量 $\boldsymbol{w}$ 本身就是 S 内各个元素即向量的线性组合。在这个意义上讲，张成子空间 W 的基向量一个也不能多。

需要注意的是，提及某个向量子空间的基时，并非说它是唯一的基，而只是强调它是其中的一组基。虽然一个向量子空间的基可能有多种选择，但所有的基都必定含有相同数目的线性无关向量，否则有较多向量的张成集合就不是基本的，不能算作一组基。从这一讨论中，很容易引出子空间的维数的概念。

定义 9.1.3 子空间 W 的任何一组基的向量个数称为 W 的维数，用符号 $\dim(W)$ 表示。若 W 的任何一组基都不是由有限个线性无关的向量组成时，则称 W 是无限维向量子空间 (infinite-dimensional vector subspace)。

由于任何一个零向量都与其他向量线性相关，所以不失一般性，通常假定在子空间的张成集合中不含零向量。

对于给定的张成集合 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n\}$，很容易构成子空间 $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n\}$ 的一组基，详见 9.2 节的讨论。

给向量子空间 W 规定一组基的一个重要原因是：能够为子空间 V 提供一坐标系。下面的定理说明了坐标系的存在性。

定理 9.1.2 令 $B=\{\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_n\}$ 是 n 维向量子空间 W 的一组基，则对于 V 中的任何一个向量 $\boldsymbol{x}$，都存在一组唯一的标量 $c_1,c_2,\cdots,c_n$，使得 $\boldsymbol{x}$ 可以表示为

$$\boldsymbol{x}=c_1\boldsymbol{b}_1+c_2\boldsymbol{b}_2+\cdots+c_n\boldsymbol{b}_n \tag{9.1.2}$$

证明 [274, p.240] 由于基 B 张成子空间 W，所以该子空间的任何一个向量都可以表示为这些基向量的线性组合，即式 (9.1.2) 成立。假定 $\boldsymbol{x}$ 存在另外一种表示

$$\boldsymbol{x}=d_1\boldsymbol{b}_1+d_2\boldsymbol{b}_2+\cdots+d_n\boldsymbol{b}_n$$

则有

$$\boldsymbol{0}=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{x}=(c_1-d_1)\boldsymbol{b}_1+(c_2-d_2)\boldsymbol{b}_2+\cdots+(c_n-d_n)\boldsymbol{b}_n$$

因为 B 的向量 $\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_n$ 线性无关，故上式成立的条件是 $c_i=d_i, i=1,2,\cdots,n$。这就证明了式 (9.1.2) 的唯一性。 ■

上述定理称为子空间向量的唯一表示定理。系数 $c_1,c_2,\cdots,c_n$ 的唯一性，使得可以利用它们构成子空间 W 表示的 n 个坐标，从而组成子空间的坐标系。

定义 9.1.4 假定集合 $B=\{\boldsymbol{b}_1,\boldsymbol{b}_2,\cdots,\boldsymbol{b}_n\}$ 是 n 维向量子空间 W 的一组基，并且 $\boldsymbol{x}\in W$，则将 $\boldsymbol{x}$ 与基 B 联系起来的坐标 (称为 $\boldsymbol{x}$ 的 B 坐标) 是满足 $\boldsymbol{x}=c_1\boldsymbol{b}_1+c_2\boldsymbol{b}_2+\cdots+c_n\boldsymbol{b}_n$ 的权系数 $c_1,c_2,\cdots,c_n$。

若 $c_1, c_2, \cdots, c_n$ 是向量 $\boldsymbol{x}$ 的 B 坐标，则称

$$[\boldsymbol{x}]_B = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \tag{9.1.3}$$

是 $\boldsymbol{x}$ 的坐标向量 (coordinate vector)。

9.1.2 无交连、正交与正交补

在子空间分析中，两个子空间之间的关系由这两个子空间的元素 (即向量) 之间的关系刻画。下面讨论子空间之间的代数关系。

子空间 $S_1, S_2, \cdots, S_n$ 的交

$$S = S_1 \cap S_2 \cap \cdots \cap S_n \tag{9.1.4}$$

是子空间 $S_1, S_2, \cdots, S_n$ 共同拥有的所有向量组成的集合。若这些子空间共同的唯一向量为零向量，即 $S = S_1 \cap S_2 \cap \cdots \cap S_n = \{\boldsymbol{0}\}$，则称子空间 $S_1, S_2, \cdots, S_n$ 无交连 (disjoint)。无交连的子空间的交 $S = S_1 \cap S_2 \cap \cdots \cap S_n$ 称为子空间的直和，记作

$$S = S_1 \oplus S_2 \oplus \cdots \oplus S_n \tag{9.1.5}$$

此时，每一个向量 $\boldsymbol{x} \in S$ 具有唯一的分解表示 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 + \cdots + \boldsymbol{a}_n$，其中，$\boldsymbol{a}_i \in S_i$。

若一向量与子空间 S 的所有向量都正交，则称该向量正交于子空间 S。推而广之，称子空间 $S_1, S_2, \cdots, S_n$ 为正交子空间，记作 $S_i \perp S_j$, $i \neq j$，若 $\forall \boldsymbol{a}_i \in S_i, \boldsymbol{a}_j \in S_j$ $(i \neq j)$，恒有 $\boldsymbol{a}_i \perp \boldsymbol{a}_j$。

特别地，与子空间 S 正交的所有向量的集合组成一个向量子空间，称为 S 的正交补 (orthogonal complement) 空间，记作 $S^{\perp}$。具体而言，令 S 为一向量空间，则称向量空间 $S^{\perp}$ 为 S 的正交补，若

$$S^{\perp} = \{\boldsymbol{x} | \boldsymbol{x}^{\mathrm{T}} \boldsymbol{y} = 0, \quad \forall \boldsymbol{y} \in S\} \tag{9.1.6}$$

子空间 S 和它的正交补 $S^{\perp}$ 的维数满足关系式

$$\dim(S) + \dim(S^{\perp}) = \dim(V) \tag{9.1.7}$$

顾名思义，子空间 S 在向量空间 V 的正交补空间 $S^{\perp}$ 含有正交和补充双重涵义：

(1) 子空间 $S^{\perp}$ 与 S 正交；

(2) 向量空间 V 是子空间 S 与 $S^{\perp}$ 的直和，即 $V = S \oplus S^{\perp}$。这表明，向量空间 V 是由子空间 S 补充 $S^{\perp}$ 而成。

下面是无交连子空间、正交子空间和正交补空间的关系。

(1) 无交连是比正交更弱的条件，这是因为：两个子空间无交连，只是表明这两个子空间没有任何一对非零的共同向量，并不意味着这两个向量之间的任何其他关系。与之相反，当子空间 S_1 和 S_2 正交时，任意两个向量 $\boldsymbol{x} \in S_1$ 和 $\boldsymbol{y} \in S_2$ 都是正交的，它们之间没有任何相关的部分，即 S_1 和 S_2 一定是无交连的。因此，无交连的两个子空间不一定正交，但正交的两个子空间必定是无交连的。

(2) 正交补空间是一个比正交子空间更严格的概念：子空间 S 在向量空间 V 的正交补 $S^{\perp}$ 一定与 S 正交，但与 S 正交的子空间一般不是 S 的正交补。例如，向量空间 V 内可能会有多个子空间 $S_1, S_2, \cdots, S_p$ 都与子空间 S 正交，只要 $\boldsymbol{x}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = 0, \forall\, \boldsymbol{x}_i \in S_i, i = 1, 2, \cdots, p;\ \boldsymbol{y} \in S$。因此，不能说其中的某个正交子空间 S_i 是 S 的正交补。由于向量空间 V 是由它的子空间 S 与正交补 $S^{\perp}$ 补充而成，所以当向量空间 V 和子空间 S 给定之后，正交补 $S^{\perp}$ 便是唯一确定的。

特别地，向量空间 R^m 的每一个向量 $\boldsymbol{u}$ 都可以用唯一的方式分解为子空间 S 的向量 $\boldsymbol{x}$ 与正交补 $S^{\perp}$ 的向量 $\boldsymbol{y}$ 之和，即

$$\boldsymbol{u} = \boldsymbol{x} + \boldsymbol{y}, \qquad \boldsymbol{x} \perp \boldsymbol{y} \tag{9.1.8}$$

这一分解形式称为向量的正交分解。向量的正交分解在信号处理、模式识别、自动控制、系统科学等学科中有着广泛的应用。

例 9.1.1 函数 $u(t)$ 称为严格平方可积分函数，记作 $u(t) \in L^2(R)$，若

$$\int_{-\infty}^{\infty} |u(t)|^2 \mathrm{d}t < \infty$$

在小波分析中，通常使用多个分辨率对平方可积分函数或信号 $u(t) \in L^2(R)$ 进行逼近，称为函数或信号的多分辨率分析。在多分辨率分析中，需要构造 $L^2(R)$ 空间内的一个子空间列或链 $\{V_j : j \in Z\}$，使它具有一些所期望的性质。其中，这个子空间列必须具有包容性：

$$\cdots \subset V_{-2} \subset V_{-1} \subset V_0 \subset V_1 \subset V_2 \subset \cdots$$

根据这一包容性知，V_j 是 V_{j+1} 的子空间。因此，一定存在 V_j 的正交补 W_j，使得

$$V_{j+1} = V_j \oplus W_j$$

式中，V_j 和 W_j 分别称为分辨率为 2^{-j} 情况下的尺度子空间和小波子空间。满足上述条件的多分辨率分析称为正交多分辨率分析。

满足关系式

$$\{0\} \subset S_1 \subset S_2 \subset \cdots \subset S_m$$

的子空间集 $\{S_1, S_2, \cdots, S_m\}$ 称为子空间套。

一个特征向量定义一个一维子空间，它相对于左乘矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是不变的。更一般地，有不变子空间 (invariant subspace) 的下述定义 [184]。

定义 9.1.5 一个子空间 $S \subseteq C^n$ 称为 (相对于) $\boldsymbol{A}$ 不变的，若

$$\boldsymbol{x} \in S \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \in S$$

例 9.1.2 令 $n \times n$ (对称或非对称) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量为 $\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n$，且 $S = \text{Span}\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n\}$，则由于 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i = \lambda_i \boldsymbol{u}_i, i = 1, 2, \cdots, n$，故

$$\boldsymbol{u}_i \in S \;\Rightarrow\; \boldsymbol{A}\boldsymbol{u}_i \in S, \quad i = 1, 2, \cdots, n$$

这表明，由 $\boldsymbol{A}$ 的特征向量张成的子空间 S 是相对于 $\boldsymbol{A}$ 不变的子空间。

对 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的任意一个特征值 λ，子空间 $\text{Null}(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})$ 是相对于 $\boldsymbol{A}$ 不变的子空间，因为

$$\boldsymbol{u} \in \text{Null}(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I}) \;\Rightarrow\; (\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0} \;\Rightarrow\; \boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \lambda \boldsymbol{u} \in \text{Null}(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})$$

零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{A} - \lambda \boldsymbol{I})$ 称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 与特征值 λ 对应的的特征空间 (eigenspace)。

令 $\boldsymbol{A} \in C^{n \times n}$，$\boldsymbol{B} \in C^{k \times k}$，$\boldsymbol{X} \in C^{n \times k}$，并且 $\boldsymbol{X} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_k]$，则 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}$ 的第 j 列为

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j &= \begin{bmatrix} b_{1j}x_{11} + b_{2j}x_{12} + \cdots + b_{kj}x_{1k} \\ b_{1j}x_{21} + b_{2j}x_{22} + \cdots + b_{kj}x_{2k} \\ \vdots \\ b_{1j}x_{n1} + b_{2j}x_{n2} + \cdots + b_{kj}x_{nk} \end{bmatrix} \\ &= b_{1j}\boldsymbol{x}_1 + b_{2j}\boldsymbol{x}_2 + \cdots + b_{kj}\boldsymbol{x}_k \end{aligned}$$

因此，若 $S = \text{Span}\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_k\}$，则

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}_j \in S, \quad j = 1, 2, \cdots, k$$

换言之，子空间 $S = \text{Span}\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_k\}$ 是相对于 $\boldsymbol{A}$ 不变的子空间，若

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}, \quad \boldsymbol{A} \in C^{n \times n},\; \boldsymbol{B} \in C^{k \times k},\; \boldsymbol{X} \in C^{n \times k} \tag{9.1.9}$$

此时，若 $\boldsymbol{X}$ 具有满列秩，并且 $(\lambda, \boldsymbol{u})$ 是矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的特征对，即 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{u} = \lambda \boldsymbol{u}$，则两边可以同时左乘满列秩矩阵 $\boldsymbol{X}$，从而有

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{u} = \lambda \boldsymbol{u} \;\Rightarrow\; \boldsymbol{X}\boldsymbol{B}\boldsymbol{u} = \lambda \boldsymbol{X}\boldsymbol{u} \;\Rightarrow\; \boldsymbol{A}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{u}) = \lambda(\boldsymbol{X}\boldsymbol{u}) \tag{9.1.10}$$

即 $\lambda(\boldsymbol{B}) \subseteq \lambda(\boldsymbol{A})$，等号成立，当且仅当 $\boldsymbol{X}$ 为正方的非奇异矩阵时。就是说，若 $\boldsymbol{X}$ 是非奇异矩阵，则 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{X}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的相似矩阵，并且 $\lambda(\boldsymbol{B}) = \lambda(\boldsymbol{A})$。这就从不变子空间的角度，又一次证明了两个相似矩阵具有相同的特征值，但它们的特征向量可能不同。

不变子空间的概念在利用子空间迭代跟踪和更新大的稀疏矩阵的特征值时，起着重要的作用。

9.1.3 子空间的正交投影与夹角

关于子空间之间的几何关系，我们会问：沿着某个子空间，到另一个子空间的投影如何描述？两个子空间之间的距离和夹角又是如何定义的？

1. *子空间的正交投影*

令 $\boldsymbol{x} \in R^n$，并且 S 和 H 是两个子空间。现在，希望使用一线性矩阵变换 $\boldsymbol{P}$，将 R^n 的向量 $\boldsymbol{x}$ 映射为子空间 S 的向量 $\boldsymbol{x}_1$。这样一种线性变换称为沿着 H 的方向到 S 的投影算子 (projector onto S along H)，常用符号 $\boldsymbol{P}_{S|H}$ 表示。若子空间 H 是 S 的正交补，则 $\boldsymbol{P}_{S|S^\perp}\boldsymbol{x}$ 是将 R^n 的向量 $\boldsymbol{x}$ 沿着与子空间 S 垂直的方向，到子空间 S 的投影，故称 $\boldsymbol{P}_{S|S^\perp}\boldsymbol{x}$ 为到子空间 S 的正交投影，常用 $\boldsymbol{P}_S$ 作数学符号。

定义 9.1.6[184, p.75] 矩阵 $\boldsymbol{P} \in C^{n\times n}$ 称为到子空间 S 的正交投影算子，若 $\text{Range}(\boldsymbol{P}) = S, \boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{P}^{\text{H}} = \boldsymbol{P}$。

对上述定义的三个条件加以解读，可以得到以下结果：

(1) 条件 $\text{Range}(\boldsymbol{P}) = S$ 意味着 $\boldsymbol{P}$ 的列空间必须等于子空间 S。若子空间 S 是矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的 n 个列向量张成的子空间，即 $S = \text{Span}(\boldsymbol{A})$，则 $\text{Range}(\boldsymbol{P}) = \text{Span}(\boldsymbol{A}) = \text{Range}(\boldsymbol{A})$。这意味着，若将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 向子空间 S 作正交投影，则其结果 $\boldsymbol{PA}$ 必须等于原矩阵 $\boldsymbol{A}$，即有 $\boldsymbol{PA} = \boldsymbol{A}$。

(2) 条件 $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$ 意味着正交投影算子必须是幂等算子。

(3) 条件 $\boldsymbol{P}^{\text{H}} = \boldsymbol{P}$ 表明，正交投影算子必须具有复共轭对称性即 Hermitian 性。

应当注意的是，在有些文献中，一般定义具有 Hermitian 性的幂等算子为正交投影算子，是因为并没有强调它是到哪一个子空间的正交投影算子。当我们需要刻意强调是到子空间 S 的正交投影算子时，就必须加上 $\text{Range}(\boldsymbol{P}) = S$ 这一条件。换言之，即使一线性算子满足幂等性和 Hermitian 性，但若其列空间与子空间 S 不一致，它便不是到子空间 S 的正交投影算子，而可能是到另外某个子空间的正交投影算子。

根据正交投影算子的定义知，若 $\boldsymbol{x} \in R^n$，则有 $\boldsymbol{Px} \in S$ 和 $(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{x} \in S^\perp$。

假定 $\boldsymbol{P}_1$ 和 $\boldsymbol{P}_2$ 都是到子空间 S 的正交投影算子，则对于任意一个向量 $\boldsymbol{x} \in R^n$，有下列结果：

$$
\begin{aligned}
\|(\boldsymbol{P}_1 - \boldsymbol{P}_2)\boldsymbol{x}\|_2^2 &= (\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{x} - \boldsymbol{P}_2\boldsymbol{x})^{\text{H}}(\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{x} - \boldsymbol{P}_2\boldsymbol{x}) \\
&= (\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{x})^{\text{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_2)\boldsymbol{x} + (\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{x})^{\text{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_1)\boldsymbol{x} \\
&\equiv 0, \quad \forall\, \boldsymbol{x}
\end{aligned}
$$

这是因为 $\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{x}$ 都是到子空间 S 的正交投影，从而有

$$
\begin{aligned}
&\boldsymbol{y}_1 = \boldsymbol{P}_1\boldsymbol{x} \in S, \quad \boldsymbol{z}_2 = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_2)\boldsymbol{x} \in S^\perp \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{y}_1^{\text{H}}\boldsymbol{z}_2 = 0 \\
&\boldsymbol{y}_2 = \boldsymbol{P}_2\boldsymbol{x} \in S, \quad \boldsymbol{z}_1 = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_1)\boldsymbol{x} \in S^\perp \quad \Rightarrow \quad \boldsymbol{y}_2^{\text{H}}\boldsymbol{z}_1 = 0
\end{aligned}
$$

由于 $\|(\boldsymbol{P}_1 - \boldsymbol{P}_2)\boldsymbol{x}\|_2^2 = 0$ 对所有非零向量 $\boldsymbol{x}$ 成立，故 $\boldsymbol{P}_1 = \boldsymbol{P}_2$，即到一个子空间的正交投影算子是唯一确定的。

对于子空间 $S = \text{Span}(\boldsymbol{A}_{m\times n})$，假定 $m \geqslant n$，并且 $\text{rank}(\boldsymbol{A}) = n$。观察知，线性变换矩阵

$$\boldsymbol{P}_S = \boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\text{H}} \tag{9.1.11}$$

满足正交投影算子定义的幂等性和 Hermitian 性。另一方面，由于 $\boldsymbol{P}_S\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}$，即 $\boldsymbol{P}$ 等价满足 $\text{Range}(\boldsymbol{P}_S) = \text{Span}(\boldsymbol{A}) = S$。因此，式 (9.1.11) 定义的线性变换算子 $\boldsymbol{P}_S$ 是到由 $\boldsymbol{A}$ 的列向量生成的子空间 S 上的正交投影算子。

如果子空间 H 与 S 不正交，则 $\boldsymbol{P}_{S|H}\boldsymbol{x}$ 称为向量 $\boldsymbol{x}$ 沿着子空间 H 的方向，到子空间 S 的斜投影，并称 $\boldsymbol{P}_{S|H}$ 为斜投影算子。

关于正交投影算子和斜投影算子，将在下一章“投影分析”作专题讨论。

2. 子空间的夹角与距离

复向量空间 C^n 内两个非零向量 $\boldsymbol{x}$ 和 $\boldsymbol{y}$ 之间的夹角记为 $\theta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y})$，它们之间的锐角由

$$\cos\theta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \frac{|\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\rangle|}{\|\boldsymbol{x}\|_2\|\boldsymbol{y}\|_2},\quad 0 \leqslant \theta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \leqslant \frac{\pi}{2} \tag{9.1.12}$$

定义。

向量 $\boldsymbol{x}$ 与子空间 S 之间的锐角定义为 $\boldsymbol{x}$ 与子空间 S 的所有向量 $\boldsymbol{y}$ 之间的最小锐角，即

$$\theta(\boldsymbol{x},S) = \min_{\boldsymbol{y}\in S}\theta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) \tag{9.1.13}$$

正交投影算子的优化性能可以使用向量与子空间之间的锐角描述。

定理 9.1.3 令 $\boldsymbol{P}$ 是到子空间 S 的正交投影算子，则对于复向量空间 C^n 内的任意向量 $\boldsymbol{x}$，有

$$\min_{\boldsymbol{y}\in S}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2 = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\|_2 \tag{9.1.14}$$

或等价为

$$\theta(\boldsymbol{x},S) = \theta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}) \tag{9.1.15}$$

证明 [397, p.63] 令 $\boldsymbol{y}$ 是子空间 S 的任一向量，它与 $\boldsymbol{x}$ 之间距离的平方为 $\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2^2$。由 $\boldsymbol{y}\in S$ 和 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\in S$ 知 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\in S$。又因为 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\perp S$，故 $(\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{x})\perp(\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y})$。于是有

$$\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2^2 = \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\|_2^2 + \|\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2^2 \geqslant \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\|_2^2$$

显然，若 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$，则不等式 $\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|_2 \geqslant \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\|_2$ 取等号，即式 (9.1.14) 得证。将式 (9.1.14) 取最小的条件 $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$ 代入，易知

$$\theta(\boldsymbol{x},S) = \min_{\boldsymbol{y}\in S}\theta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{y}) = \frac{|\langle\boldsymbol{x},\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\rangle|}{\|\boldsymbol{x}\|_2\|\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\|_2} = \theta(\boldsymbol{x},\boldsymbol{P}\boldsymbol{x})$$

即式 (9.1.15) 得证。 ■

定理 9.1.3 表明，复向量空间 C^n 内任意一个向量 $\boldsymbol{x}$ 在向量空间 S 的最优逼近由投影 $\boldsymbol{P}_S\boldsymbol{x}$ 决定，其他任何逼近形式都不可能比 $\boldsymbol{P}_S\boldsymbol{x}$ 更接近 $\boldsymbol{x}$。

定义 9.1.7[184, p.76] 假定 S_1 和 S_2 是 C^n 的两个子空间，并且 $\dim(S_1)=\dim(S_2)$，则这两个子空间之间的距离定义为

$$\text{dist}(S_1,S_2)=\|\boldsymbol{P}_{S_1}-\boldsymbol{P}_{S_2}\|_{\text{F}} \tag{9.1.16}$$

式中，$\boldsymbol{P}_{S_i}$ 是到子空间 $S_i, i=1,2$ 的正交投影算子。

由式 (9.1.11) 知，到子空间 $S_1=\text{Span}(\boldsymbol{x})$ 的正交投影算子 $\boldsymbol{P}_{S_1}$ 和到 $S_2=\text{Span}(\boldsymbol{y})$ 的正交投影算子 $\boldsymbol{P}_{S_2}$ 分别为

$$\boldsymbol{P}_{S_1}=\boldsymbol{x}(\boldsymbol{x}^{\text{T}}\boldsymbol{x})^{-1}\boldsymbol{x}^{\text{T}}=\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\text{T}}$$
$$\boldsymbol{P}_{S_2}=\boldsymbol{y}(\boldsymbol{y}^{\text{T}}\boldsymbol{y})^{-1}\boldsymbol{y}^{\text{T}}=\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\text{T}}$$

定义两个正交矩阵

$$\boldsymbol{U}=\begin{bmatrix}\cos(\theta_1) & -\sin(\theta_1)\\ \sin(\theta_1) & \cos(\theta_1)\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\cos(\theta_2) & -\sin(\theta_2)\\ \sin(\theta_2) & \cos(\theta_2)\end{bmatrix}$$

则

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{U}^{\text{T}}\boldsymbol{x}&=\begin{bmatrix}1\\0\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{x}^{\text{T}}\boldsymbol{V}=[\cos(\theta_1-\theta_2),\ \sin(\theta_1-\theta_2)]\\
&\Rightarrow \boldsymbol{U}^{\text{T}}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\text{T}}\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\cos(\theta_1-\theta_2) & \sin(\theta_1-\theta_2\\ 0 & 0\end{bmatrix}\\
\boldsymbol{U}^{\text{T}}\boldsymbol{y}&=\begin{bmatrix}\cos(\theta_1-\theta_2)\\ -\sin(\theta_1-\theta_2)\end{bmatrix},\qquad \boldsymbol{y}^{\text{T}}\boldsymbol{V}=[1,\ 0]\\
&\Rightarrow \boldsymbol{U}^{\text{T}}\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\text{T}}\boldsymbol{V}=\begin{bmatrix}\cos(\theta_1-\theta_2) & 0\\ -\sin(\theta_1-\theta_2) & 0\end{bmatrix}
\end{aligned}$$

注意到 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 都是正交矩阵，故有

$$\begin{aligned}
\|\boldsymbol{U}^{\text{T}}(\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\text{T}}-\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\text{T}})\boldsymbol{V}\|_{\text{F}}=\|\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\text{T}}-\boldsymbol{y}\boldsymbol{y}^{\text{T}}\|_{\text{F}}&=\left\|\begin{matrix}0 & \sin(\theta_1-\theta_2)\\ \sin(\theta_1-\theta_2) & 0\end{matrix}\right\|_{\text{F}}\\
&=|\sin(\theta_1-\theta_2)|
\end{aligned}$$

最后，得

$$\text{dist}(S_1,S_2)=\|\boldsymbol{P}_{S_1}-\boldsymbol{P}_{S_2}\|_{\text{F}}=|\sin(\theta_1-\theta_2)|$$

即子空间 S_1 和 S_2 的距离等于这两个子空间之间的夹角 $\theta=\theta_1-\theta_2$ 的正弦的绝对值。

9.1.4 主角与补角

当两个子空间的基向量不止一个时，子空间之间的夹角显然会有多个。此时，两个子空间之间的角度是直线与平面之间角度概念的推广。

给定 n 维 Hilbert 空间 V 的两个子空间 H_1 和 H_2，则两个子空间之间的夹角有多个。这些角度的个数与两个子空间的最小秩数相同。不妨令 $\dim(H_1)=p$, $\dim(H_2)=q$，并且 $p>q$，则 H_1 和 H_2 之间的夹角共有 q 个。

定义 9.1.8 [184] 子空间 H_1 与 H_2 之间的第 i 主角 (principal angle) $\phi_i(H_1,H_2)$ 是介于 0 和 $\pi/2$ 之间的角度，定义为

$$\phi_i(H_1,H_2) = \arccos\left(\max_{\boldsymbol{u}\in H_1}\max_{\boldsymbol{v}\in H_2}\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v}\right) = \arccos\left(\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v}_i\right) \tag{9.1.17}$$

约束条件为

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v} = 1\\ \boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_j = 0, \quad j = 1,2,\cdots,i-1\\ \boldsymbol{v}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v}_j = 0, \quad j = 1,2,\cdots,i-1\end{aligned}\right\} \tag{9.1.18}$$

式中，$\boldsymbol{u}_i$ 和 $\boldsymbol{v}_i$ 是 ϕ_i 达到第 i 个最大值时的向量 $\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{v}$。

在这些主角之中，最小的主角称为最小角度 (minimum angle)。

定义 9.1.9 [250] 子空间 H_1 与 H_2 之间的最小角度 $\phi(H_1,H_2)$ 是介于 0 和 $\pi/2$ 之间的角度，其余弦定义为

$$\cos\phi(H_1,H_2) \stackrel{\text{def}}{=} \max\left\{\left|\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v}\right| : \boldsymbol{u}\in H_1,\, \boldsymbol{v}\in H_2,\, \|\boldsymbol{u}\| = 1,\, \|\boldsymbol{v}\| = 1\right\} \tag{9.1.19}$$

显然，两个子空间之间的最小角度就是它们之间的第 1 个主角。

若将两个子空间的相交部分排除在外，即可得到与最小角度略有不同的角度定义。令 $H_{1:2} \stackrel{\text{def}}{=} H_1 \cap H_2$。

定义 9.1.10 [250] 子空间 H_2 与 H_1 之间的补角 (complementary angle) 定义为

$$\phi_{\mathrm{c}}(H_2,H_1) = \phi(H_2\cap H_{1:2}^{\perp}, H_1\cap H_{1:2}^{\perp}) \tag{9.1.20}$$

式中，$H_{1:2}^{\perp}$ 是 $H_{1:2}$ 的正交补空间。

注意，若两个子空间无交连，即 $H_1\cap H_2 = \{\boldsymbol{0}\}$，则这两个子空间之间的补角与最小角度相同，即 $\phi_{\mathrm{c}}(H_1,H_2) = \phi(H_1,H_2)$。

关于补角的取值，Lorch[285] 证明了以下结果。

引理 9.1.1 令 H_1 和 H_2 是 Hilbert 空间 V 的闭合子空间，则

$$\phi_{\mathrm{c}}(H_1,H_2) > 0 \tag{9.1.21}$$

当且仅当 $H_1 + H_2$ 是闭合的。

9.1.5 子空间的旋转

在工程中经常会对同一对象进行多次测量，并且每一次的测量数据并不完全相同。令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 分别是两次测量得到的 $m\times n$ 数据矩阵。现在，希望求一个 $n\times n$ 实正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$，在 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$ 的约束条件下，使得

$$\min \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{Q}\|_{\mathrm{F}} \tag{9.1.22}$$

即通过正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$，强迫 $\boldsymbol{B}\boldsymbol{Q}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 尽可能一致。

上述问题称为正交强迫一致问题 (orthogonal Procrustes problem)，它最早是 Green 于 1952 年在计量心理学杂志上提出的 [192]。由于 $\boldsymbol{Q}$ 是正交矩阵，矩阵乘积 $\boldsymbol{BQ}$ 并不改变 $\boldsymbol{B}$ 的列向量之间的线性无关性，所以列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{BQ}) = \text{Col}(\boldsymbol{B})$。另一方面，矩阵乘积 $\boldsymbol{BQ}$ 相当于使矩阵 $\boldsymbol{B}$ 旋转。因此，从子空间的角度看问题，正交强迫一致的运算相当于使列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{B})$ 旋转进入列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 内。显然，矩阵的 Frobenius 范数 $\|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{BQ}\|_F$ 起着度量正交强迫一致问题的解的质量的作用。

显而易见，为了实现 $\|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{BQ}\|_F^2$ 的最小化，应该选择正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 使得 $\boldsymbol{BQ}$ 具有与 $\boldsymbol{A}$ 完全相同的非对角元素，并且对角元素的平方和尽可能接近。此时，矩阵范数平方和 $\|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{BQ}\|_F^2$ 可以写成迹函数的形式：

$$\|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{BQ}\|_F^2 = \text{tr}(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}) + \text{tr}(\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{B}) - 2\text{tr}(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A})$$

于是，式 (9.1.22) 等价于使矩阵的迹 $\text{tr}(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A})$ 最大化。

迹函数 $\text{tr}(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A})$ 的最大化可以通过矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解 [184, p.582] 来实现。令矩阵 $\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解为 $\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^T$，式中，$\boldsymbol{\Sigma} = \text{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)$。若定义正交矩阵 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{V}^T\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{U}$，则有

$$\begin{aligned}\text{tr}(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A}) &= \text{tr}(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{U\Sigma V}^T) = \text{tr}(\boldsymbol{V}^T\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{U\Sigma}) \\ &= \text{tr}(\boldsymbol{Z\Sigma}) = \sum_{i=1}^{n} z_{ii}\sigma_i \\ &\leqslant \sum_{i=1}^{n} \sigma_i\end{aligned}$$

当且仅当 $\boldsymbol{Z} = \boldsymbol{I}$ 即 $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{UV}^T$ 时，等号成立。换言之，若选择 $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{UV}^T$，则 $\text{tr}(\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A})$ 取最大值，从而使 $\|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{BQ}\|_F$ 取最小值。

以上分析表明，若 $\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^T$ 是矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解，则 $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{UV}^T$ 就是正交强迫一致问题式 (9.1.22) 的解。

解矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 称为矩阵乘积 $\boldsymbol{B}^T\boldsymbol{A}$ 的正交极因子 (orthogonal polar factor) [184]，因为正交强迫一致问题相当于将矩阵 $\boldsymbol{A}$ 分解为 $\boldsymbol{BQ}$，而这种矩阵分解称为极式分解 (polar decomposition)，它因与复数的极坐标分解 $z = |z|e^{j\arg(z)}$ 类似而得名。关于矩阵的极式分解及其应用，读者可进一步参考文献 [48] 和文献 [219]。

有意思的是，若 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{I}_n$，则正交强迫一致问题变为

$$\boldsymbol{Q} = \min_{\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}} \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{Q}\|_F$$

这一问题的数学描述是：求与已知 $n \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 最接近的正交矩阵。根据前面的分析，若 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U\Sigma V}^T$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解，则 $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{UV}^T$ 是与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 最接近的正交矩阵。

9.1.6 信号空间的线性无关性

在信号处理等应用中，常常会对几个信号是否线性无关感兴趣。令 $u_1(k), u_2(k), \cdots,$

$u_m(k)$ 是 m 个感兴趣的离散信号。显然，这 m 个信号线性无关，若方程

$$c_1u_1(k) + c_2u_2(k) + \cdots + c_mu_m(k) = 0, \qquad \forall \text{整数}\, k \tag{9.1.23}$$

意味着 $c_1 = c_2 = \cdots = c_m = 0$。

既然方程式 (9.1.23) 对所有 k 成立，自然它对 k 后面 $m-1$ 个相邻的离散时间 $k+1, k+2, \cdots, k+m-1$ 也应该成立, 即有

$$\begin{gathered} c_1u_1(k+1) + c_2u_2(k+1) + \cdots + c_mu_m(k+1) = 0, \quad \forall k \\ \vdots \\ c_1u_1(k+m-1) + c_2u_2(k+m-1) + \cdots + c_mu_m(k+m-1) = 0, \quad \forall k \end{gathered}$$

与式 (9.1.23) 联立，并写成矩阵方程，有

$$\begin{bmatrix} u_1(k) & u_2(k) & \cdots & u_m(k) \\ u_1(k+1) & u_2(k+1) & \cdots & u_m(k+1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ u_1(k+m-1) & u_2(k+m-1) & \cdots & u_m(k+m-1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \forall k \tag{9.1.24}$$

式中，$m \times m$ 系数矩阵称为信号的 Casorati 矩阵，其行列式称为 $u_1(k), u_2(k), \cdots, u_m(k)$ 的 Casorati 行列式 [274, p.273]。

由齐次方程组易知：仅当 Casorati 矩阵非奇异时，(9.1.24) 有唯一的零解 $c_1 = c_2 = \cdots = c_m = 0$。此时，$m$ 个信号 $u_1(k), u_2(k), \cdots, u_m(k)$ 线性无关。因此，只要证明 Casorati 矩阵对一个 k 值为非奇异矩阵即可。自然地，最简单的情况是检验 $k = 0$ 时 Casorati 矩阵的非奇异性。

上述线性无关性也称信号空间的线性无关性 [274]。

例 9.1.3 确定信号 $5^k\cos(k\pi/2)$ 和 $5^k\sin(k\pi/2)$ 是否是差分方程

$$x(k+2) + 25x(k) = 0 \tag{1}$$

的解集的一组基？

解 一组信号是否为某个差分方程的解集的一组基，必须满足两个条件：它们必须是差分方程的一组解，并且这些信号线性无关。容易验证 $5^k\cos(k\pi/2)$ 和 $5^k\sin(k\pi/2)$ 是差分方程的一组解。这两个信号的 Casorati 矩阵为

$$\boldsymbol{C}_k = \begin{bmatrix} 5^k\cos(k\pi/2) & 5^k\sin(k\pi/2) \\ 5^{k+1}\cos[(k+1)\pi/2] & 5^{k+1}\sin[(k+1)\pi/2] \end{bmatrix}$$

取 $k = 0$, 则

$$\boldsymbol{C}_0 = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 5 \end{bmatrix}$$

由 Casorati 矩阵的非奇异性可以判断，信号 $5^k\cos(k\pi/2)$ 和 $5^k\sin(k\pi/2)$ 线性无关。由于 $5^k\cos(k\pi/2)$ 和 $5^k\sin(k\pi/2)$ 既是差分方程的解，又是线性无关的，故它们是差分方程的解集的一组基。

9.2 列空间、行空间与零空间

在对向量子空间进行分析之前，有必要先了解与矩阵密切相关的基本空间：列空间、行空间和零空间。

9.2.1 矩阵的列空间、行空间与零空间

为方便叙述，对于矩阵 $\boldsymbol{A} \in C^{m\times n}$，其 m 个行向量记作

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}_1 &= [a_{11}, a_{12}, \cdots, a_{1n}]\\ \boldsymbol{r}_2 &= [a_{21}, a_{22}, \cdots, a_{2n}]\\ &\cdots\\ \boldsymbol{r}_m &= [a_{m1}, a_{m2}, \cdots, a_{mn}]\end{aligned}$$

n 个列向量记作

$$\boldsymbol{a}_1 = \begin{bmatrix} a_{11}\\ a_{21}\\ \vdots\\ a_{m1}\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{a}_2 = \begin{bmatrix} a_{12}\\ a_{22}\\ \vdots\\ a_{m2}\end{bmatrix},\quad \cdots,\quad \boldsymbol{a}_n = \begin{bmatrix} a_{1n}\\ a_{2n}\\ \vdots\\ a_{mn}\end{bmatrix}$$

定义 9.2.1 若 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n] \in C^{m\times n}$ 为复矩阵，则其列向量的所有线性组合的集合构成一个子空间，称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间 (column space) 或列张成 (column span)，用符号 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 表示，即有

$$\text{Col}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\} \tag{9.2.1}$$

$$= \left\{\boldsymbol{y} \in C^m:\ \boldsymbol{y} = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \boldsymbol{a}_j:\ \alpha_j \in C\right\} \tag{9.2.2}$$

类似地，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的复共轭行向量 $\boldsymbol{r}_1^*, \boldsymbol{r}_2^*, \cdots, \boldsymbol{r}_m^* \in C^n$ 的所有线性组合的集合称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间 (row space) 或行张成 (row span)，用符号 $\text{Row}(\boldsymbol{A})$ 表示，即有

$$\text{Row}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{\boldsymbol{r}_1^*, \boldsymbol{r}_2^*, \cdots, \boldsymbol{r}_m^*\} \tag{9.2.3}$$

$$= \left\{\boldsymbol{y} \in C^n:\ \boldsymbol{y} = \sum_{i=1}^{m} \beta_i \boldsymbol{r}_i^*:\ \beta_i \in C\right\} \tag{9.2.4}$$

在有些文献中，常用符号 $\text{Span}\{\boldsymbol{A}\}$ 作为 $\boldsymbol{A}$ 的列空间的略写，即

$$\text{Col}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\} \tag{9.2.5}$$

类似地，符号 Span($\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$) 表示 $\boldsymbol{A}$ 的复共轭转置矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的列空间。由于 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的列向量就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的复共轭行向量，故

$$\mathrm{Row}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Col}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=\mathrm{Span}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{r}_1^*,\boldsymbol{r}_2^*,\cdots,\boldsymbol{r}_m^*\} \tag{9.2.6}$$

即复矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间与复共轭转置矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的列空间等价。

将复矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间定义为其复共轭行向量 $\boldsymbol{r}_1^*,\boldsymbol{r}_2^*,\cdots,\boldsymbol{r}_m^*$ 的所有线性组合的集合，虽然在形式上比直接定义为 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_m$ 的所有线性组合的集合略显复杂，但在利用矩阵的奇异值分解得到行空间时，却会带来很大的方便，详见 9.3 节。

行空间和列空间是直接针对矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 本身定义的向量子空间。此外，还有另外两个向量子空间不是直接用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 定义，而是通过矩阵变换 $\boldsymbol{Ax}$ 定义的。这两个子空间是映射或变换的值域和零空间。

在第 1 章中，映射 T 的值域定义为 $T(\boldsymbol{x})\neq\boldsymbol{0}$ 的所有值的集合，而映射 T 的核或零空间则定义为满足 $T(\boldsymbol{x})=\boldsymbol{0}$ 的所有非零解向量 $\boldsymbol{x}$ 的集合。很自然地，若线性映射 $\boldsymbol{y}=T(\boldsymbol{x})$ 是从 C^n 空间到 C^m 空间的矩阵变换，即 $\boldsymbol{y}_{m\times 1}=\boldsymbol{A}_{m\times n}\boldsymbol{x}_{n\times 1}$，则对于一个给定的矩阵 $\boldsymbol{A}$，矩阵变换 $\boldsymbol{Ax}$ 的值域定义为向量 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{Ax}$ 的所有值的集合；而零空间则定义为满足 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的向量 $\boldsymbol{x}$ 的集合。在一些文献 (特别是工程文献) 中，常将矩阵变换 $\boldsymbol{Ax}$ 的值域和零空间分别直接当作矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的值域和零空间，即有以下定义。

定义 9.2.2 若 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m\times n$ 复矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 的值域 (range) 定义为

$$\mathrm{Range}(\boldsymbol{A})=\{\boldsymbol{y}\in C^m:\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{y},\quad \boldsymbol{x}\in C^n\} \tag{9.2.7}$$

矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的零空间 (null space) 也称 $\boldsymbol{A}$ 的核 (kernel)，定义为满足齐次线性方程 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的所有解向量的集合，即

$$\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Ker}(\boldsymbol{A})=\{\boldsymbol{x}\in C^n:\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}\} \tag{9.2.8}$$

类似地，复矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的共轭转置 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的零空间定义为

$$\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=\mathrm{Ker}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=\{\boldsymbol{x}\in C^m:\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}\} \tag{9.2.9}$$

零空间的维数称为 $\boldsymbol{A}$ 的零化维 (nullity)，即有

$$\mathrm{nullity}(\boldsymbol{A})=\dim[\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})] \tag{9.2.10}$$

若 $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n]$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的列分块，不妨令 $\boldsymbol{x}=[\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_n]^{\mathrm{T}}$，则 $\boldsymbol{Ax}=\sum\limits_{j=1}^{n}\alpha_j\boldsymbol{a}_j$，故立即有

$$\mathrm{Range}(\boldsymbol{A})=\left\{\boldsymbol{y}\in C^m:\ \boldsymbol{y}=\sum_{j=1}^{n}\alpha_j\boldsymbol{a}_j:\alpha_j\in C\right\}=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n\}$$

表明矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的值域就是 $\boldsymbol{A}$ 的列空间，即有

$$\text{Range}(\boldsymbol{A}) = \text{Col}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\} \tag{9.2.11}$$

类似地，有

$$\text{Range}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}) = \text{Col}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}) = \text{Span}\{\boldsymbol{r}_1^*, \boldsymbol{r}_2^*, \cdots, \boldsymbol{r}_m^*\} \tag{9.2.12}$$

定理 9.2.1 若 $\boldsymbol{A}$ 是 $m \times n$ 复矩阵，则 $\boldsymbol{A}$ 的行空间的正交补 $(\text{Row}(\boldsymbol{A}))^{\perp}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的零空间，并且 $\boldsymbol{A}$ 的列空间的正交补 $(\text{Col}(\boldsymbol{A}))^{\perp}$ 是 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 的零空间，即有

$$(\text{Row}(\boldsymbol{A}))^{\perp} = \text{Null}(\boldsymbol{A}), \qquad (\text{Col}\,\boldsymbol{A})^{\perp} = \text{Null}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}) \tag{9.2.13}$$

证明 令矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行向量为 $\boldsymbol{r}_i, i = 1, 2, \cdots, m$。由矩阵的乘法规则知，若 $\boldsymbol{x}$ 位于零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{A})$，即满足 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$，则 $\boldsymbol{r}_i\boldsymbol{x} = 0$。写成两个列向量正交的标准形式，为 $(\boldsymbol{r}_i^{\text{H}})^{\text{H}}\boldsymbol{x} = 0, i = 1, 2\cdots, m$。这意味着，向量 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{r}_1^{\text{H}}, \boldsymbol{r}_2^{\text{H}}, \cdots, \boldsymbol{r}_m^{\text{H}}$ 的线性张成正交，即

$$\boldsymbol{x} \perp \text{Span}\{\boldsymbol{r}_1^{\text{H}}, \boldsymbol{r}_2^{\text{H}}, \cdots, \boldsymbol{r}_m^{\text{H}}\} = \text{Col}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}) = \text{Row}(\boldsymbol{A})$$

从而 $\boldsymbol{x}$ 的所有集合即 $\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 与 $\text{Row}(\boldsymbol{A})$ 正交。反之，若 $\boldsymbol{x}$ 与 $\text{Row}(\boldsymbol{A}) = \text{Col}(\boldsymbol{A}^{\text{H}})$ 正交，则有 $\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{r}_i^{\text{H}}, i = 1, 2, \cdots, m$ 正交，即 $(\boldsymbol{r}_i^{\text{H}})\boldsymbol{x} = 0$，等价为 $\boldsymbol{r}_i\boldsymbol{x} = 0, i = 1, 2, \cdots, m$ 或 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0}$。这表明，与 $\text{Row}(\boldsymbol{A})$ 正交的向量 $\boldsymbol{x}$ 的集合是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的零空间。因此，有 $(\text{Row}(\boldsymbol{A}))^{\perp} = \text{Null}(\boldsymbol{A})$。

在 $(\text{Row}(\boldsymbol{B}_{n\times m}))^{\perp} = \text{Null}(\boldsymbol{B})$ 中令 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{A}_{m\times n}^{\text{H}}$，立即有

$$(\text{Row}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}))^{\perp} = \text{Null}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}) \;\Rightarrow (\text{Col}(\boldsymbol{A}))^{\perp} = \text{Null}(\boldsymbol{A}^{\text{H}})$$

这就完成了本定理的证明。 ■

总结以上讨论，即可得到与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的向量子空间之间的关系：

(1) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的值域与列空间相等，即

$$\text{Range}(\boldsymbol{A}) = \text{Col}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\}$$

(2) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间与 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 的列空间相等，即

$$\text{Row}(\boldsymbol{A}) = \text{Col}(\boldsymbol{A}^{\text{H}}) = \text{Range}(\boldsymbol{A}^{\text{H}})$$

(3) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间的正交补等于 $\boldsymbol{A}$ 的零空间，即

$$(\text{Row}(\boldsymbol{A}))^{\perp} = \text{Null}(\boldsymbol{A})$$

(4) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间的正交补就是 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 的零空间，即

$$(\text{Col}(\boldsymbol{A}))^{\perp} = \text{Null}(\boldsymbol{A}^{\text{H}})$$

既然矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 是其列向量的所有线性组合的集合，那么列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 便只由那些线性无关的列向量 $\boldsymbol{a}_{i_1}, \boldsymbol{a}_{i_2}, \cdots, \boldsymbol{a}_{i_k}$ 决定，而与这些列向量线性相关的其他列向量对于列空间的生成则是多余的。

子集合 $\{\boldsymbol{a}_{i_1}, \boldsymbol{a}_{i_2}, \cdots, \boldsymbol{a}_{i_k}\}$ 是列向量集合 $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\}$ 的最大线性无关子集合 (maximal linearly independent subset)，若 $\boldsymbol{a}_{i_1}, \boldsymbol{a}_{i_2}, \cdots, \boldsymbol{a}_{i_k}$ 线性无关，并且这些线性无关的列向量不包含在 $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\}$ 的任何其他线性无关的子集合中。

若 $\{\boldsymbol{a}_{i_1}, \boldsymbol{a}_{i_2}, \cdots, \boldsymbol{a}_{i_k}\}$ 是最大线性无关子集合，则

$$\text{Span}\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\} = \text{Span}\{\boldsymbol{a}_{i_1}, \boldsymbol{a}_{i_2}, \cdots, \boldsymbol{a}_{i_k}\} \tag{9.2.14}$$

并称最大线性无关子集合 $\{\boldsymbol{a}_1, \boldsymbol{a}_2, \cdots, \boldsymbol{a}_n\}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 的基。显然，对于一个给定的矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$，它的基可以有不同的组合形式，但所有基形式都必须包含相同的向量 (基向量) 个数。这个共同的向量个数称为矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 的维数，用符号 $\dim[\text{Col}(\boldsymbol{A})]$ 表示。又由于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的秩定义为线性无关的列向量个数，故矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩与列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 的维数是一致的，即也可以将秩定义为

$$\text{rank}(\boldsymbol{A}) = \dim[\text{Col}(\boldsymbol{A})] = \dim[\text{Range}(\boldsymbol{A})] \tag{9.2.15}$$

一个自然的问题是：矩阵的列空间和零空间之间有什么样的联系？事实上，这两个子空间存在很大的不同，详见表 9.2.1。

表 9.2.1 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的零空间与列空间的对比 [274, p.226]

零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{A})$	列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$
$\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 是 C^m 的子空间	$\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 是 C^n 的子空间
$\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 为隐含定义，与 $\boldsymbol{A}$ 的列向量无直接关系	$\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 为显式定义，直接由 $\boldsymbol{A}$ 的所有列向量张成
$\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 的基应满足 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$	$\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 的基是 $\boldsymbol{A}$ 的主元列
$\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 与矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的元素无任何明显关系	矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的每一列都在 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 内
$\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 的典型向量 $\boldsymbol{v}$ 满足 $\boldsymbol{Av} = \boldsymbol{0}$	$\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 的典型向量满足 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{v}$ 为一致方程
$\boldsymbol{v} \in \text{Null}(\boldsymbol{A})$ 的条件：$\boldsymbol{Av} = 0$	$\boldsymbol{v} \in \text{Col}(\boldsymbol{A})$ 的条件：$[\boldsymbol{A}, \boldsymbol{v}]$ 与 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的秩
$\text{Null}(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{0}\}$ 当且仅当 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ 只有非零解	$\text{Col}(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{0}\}$ 当且仅当 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ 有解
$\text{Null}(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{0}\}$ 当且仅当 $\boldsymbol{Ax}$ 为一对一映射	$\text{Col}(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{0}\}$ 当且仅当 $\boldsymbol{Ax}$ 为 C^n 到 C^m 的映射

Moore-Penrose 广义逆矩阵也可以利用到值域空间 $\text{Range}(\boldsymbol{A})$ 的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{\text{Range}(\boldsymbol{A})}$ 和到零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 的正交补的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{(\text{Null}(\boldsymbol{A}))^\perp}$ 定义。

定理 9.2.2 [364] 令 $\boldsymbol{A}$ 是一个 $m \times n$ 矩阵，则存在一个唯一的 $m \times n$ 矩阵 $\boldsymbol{G}$ 使得下列条件满足：

$$\boldsymbol{AG} = \boldsymbol{P}_{\text{Range}(\boldsymbol{A})}, \quad \boldsymbol{GA} = \boldsymbol{P}_{(\text{Null}(\boldsymbol{A}))^\perp}, \quad \boldsymbol{GAG} = \boldsymbol{G}$$

满足定理条件的矩阵 $\boldsymbol{G}$ 实质上就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Moore-Penrose 广义逆矩阵。

9.2.2 子空间的基构造：初等变换法

如上所述，矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的列空间和行空间分别由 $\boldsymbol{A}$ 的 n 个列向量和 m 个行向量张成。但是，如果矩阵的秩 $r=\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})$，则只需要矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 r 个线性无关列向量或行向量 (即基)，即可分别生成列空间 $\mathrm{Span}(\boldsymbol{A})$ 和行空间 $\mathrm{Span}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$。显然，使用基向量是一种更加经济和更好的子空间表示法。那么，如何寻找所需要的基向量呢？下面讨论矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间 $\mathrm{Row}(\boldsymbol{A})$、列空间 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})$ 以及零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})$ 和 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 的基的构造。

下面的四个定理分别表明，矩阵的初等变换不会改变矩阵的行空间、列空间与零空间。

定理 9.2.3 初等行变换不改变一个矩阵的行空间。

证明 令 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_m$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的行向量，矩阵 $\boldsymbol{B}_{m\times n}$ 是通过对 $\boldsymbol{A}$ 进行初等行变换得到的矩阵。为此，需要证明：$\boldsymbol{B}$ 的行空间里的每一个向量都在 $\boldsymbol{A}$ 的行空间里。反之，$\boldsymbol{A}$ 的行空间里的每一个向量也在 $\boldsymbol{B}$ 的行空间里。

如果 $\boldsymbol{B}$ 只是 $\boldsymbol{A}$ 的 I 型初等行变换 (某些行的互换)，则 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 显然具有相同的行向量，只是顺序排列不同而已，因此 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的行空间。若 $\boldsymbol{B}$ 是 $\boldsymbol{A}$ 的 II 型初等行变换，则 $\boldsymbol{B}$ 的所有行向量 $\boldsymbol{r}_1',\boldsymbol{r}_2',\cdots,\boldsymbol{r}_m'$ 只是 $\boldsymbol{A}$ 的相应行向量 $\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_m$ 分别相乘一个可能不同的非零标量 (未被变换的行相当于乘 1) 而已。当对 $\boldsymbol{A}$ 进行III型初等行变换 (某行乘非零因子后，再加到另外一行) 时，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行向量 $\boldsymbol{r}_i'$ 相当于是 $\boldsymbol{A}$ 的某些行向量的线性组合。显然，在这两种情况下，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的任何一个行向量 $\boldsymbol{r}_i'$ 都可以视为 $\boldsymbol{A}$ 的某些行向量的线性组合，即 $\boldsymbol{A}$ 的初等行变换结果 $\boldsymbol{B}$ 的行向量 $\boldsymbol{r}_i'(i=1,2,\cdots,m)$ 都位于 $\boldsymbol{A}$ 的行空间内。

接下来证明矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行向量也在行初等变换结果 $\boldsymbol{B}$ 的行空间里。显然，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以看作是矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的初等行逆变换，而初等行逆变换与初等行变换之间的差别只是某行乘非零因子 α 变成乘非零因子 $1/\alpha$，与某行相加变成与另一行相减，因此 $\boldsymbol{A}$ 的每一个行向量一定位于 $\boldsymbol{B}$ 的行空间内。综合以上结果知，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 具有相同的行空间。 ■

定理 9.2.4 初等列变换不改变一个矩阵的列空间。

证明 与定理 9.2.3 的证明相类似，留给读者作练习。

定理 9.2.5 初等行变换不改变矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})$。

证明 令基本矩阵 $\boldsymbol{E}_i$ 是对应于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 第 i 次初等行变换的矩阵。由于对于 I $\sim$ III 型初等行变换，相对应的基本矩阵的行列式都不等于零，故基本矩阵 $\boldsymbol{E}_i$ 非奇异。于是，

$$\boldsymbol{Bx}=(\boldsymbol{E}_k\boldsymbol{E}_{k-1}\cdots\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{A})\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}\ \Leftrightarrow\ \boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$$

即齐次线性方程 $\boldsymbol{Bx}=\boldsymbol{0}$ 与 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 具有相同的解向量，从而 $\boldsymbol{A}$ 经过若干次初等行变换后得到的矩阵 $\boldsymbol{B}$ 与 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的零空间。 ■

定理 9.2.6 初等列变换不改变矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$。

证明 与定理 9.2.5 的证明相类似，留给读者作习题。

下面的定理给出了利用矩阵的初等行变换或者初等列变换构造所需要的子空间的方法。

定理 9.2.7 令矩阵 $A_{m\times n}$ 经过初等行变换后，变成阶梯型矩阵 B，则

(1) 阶梯型矩阵 B 的非零行组成矩阵 A 和 B 的行空间的一组基；

(2) 矩阵 A 的主元列组成列空间 $\text{Col}(A)$ 的一组基。

证明 (1) 由定理 9.2.3 知，初等行变换不改变矩阵的行空间，故 $\text{Row}(A) = \text{Row}(B)$。如果 B 是阶梯型，则它的非零行是线性无关的，因为没有任何一个非零行是它下面的非零行的线性组合。因此，B 的非零行组成行空间 $\text{Row}(B)$ 的基，从而也是 $\text{Row}(A)$ 的一组基。

(2) 阶梯型矩阵 B 的所有主元列的集合是线性无关的，因为集合中的任何向量都不可能是其他向量的线性组合。由于 A 和 B 是行等价的，故 A 的主元列也线性无关，因为 A 各列中的任何线性相关关系都对应为 B 的列之间的线性相关关系。同理，A 的每一个非主元列是 A 的主元列的线性组合。因此，根据张成集定理，这些非主元列都可以从列空间 $\text{Col}(A)$ 的张成集中删去，剩下的主元列则构成 $\text{Col}(A)$ 的一组基。 ■

以上证明参考文献 [274, pp.257~258] 和文献 [274, p.236] 而成。

总结以上讨论，可得到构造矩阵的行空间和列空间的基向量的初等变换法如下：

初等行变换法 令矩阵 A 经过初等行变换，变为简约阶梯型矩阵 B_r。

(1) 简约阶梯型 B_r 所有主元位置所在的非零行构成行空间 $\text{Row}(A)$ 的基；

(2) 矩阵 A 的主元列组成列空间 $\text{Col}(A)$ 的基；

(3) 矩阵 A 的非主元列组成零空间 $\text{Null}(A^{\text{H}})$ 的基。

初等列变换法 令矩阵 A 经过初等列变换，变为列形式的简约阶梯型矩阵 B_c。

(1) 列形式的阶梯型矩阵 B_c 所有主元位置所在的非零列构成列空间 $\text{Col}(A)$ 的基；

(2) 矩阵 A 的主元行组成行空间 $\text{Row}(A)$ 的基；

(3) 矩阵 A 的非主元行组成零空间 $\text{Null}(A)$ 的基。

下面举例加以说明。

例 9.2.1 求 3×3 矩阵

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ -1 & -1 & 1 \\ 1 & 4 & 5 \end{bmatrix}$$

的行空间与列空间。

解法 1 依次进行初等列变换：$C_2 - 2C_1$ (第 1 列乘 -2，与第 2 列相加)，$C_3 - C_1, C_1 + C_2, C_3 - 2C_2$，变换结果为

$$B_c = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 3 & 2 & 0 \end{bmatrix}$$

由此得到两个线性无关的列向量 $c_1 = [1, 0, 3]^{\text{T}}, c_2 = [0, 1, 2]^{\text{T}}$，它们就是列空间 $\text{Col}(A)$ 的基，即

$$\text{Col}(A) = \text{Span}\left\{ \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 3 \end{bmatrix},\ \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} \right\}$$

根据列简约阶梯型矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的主元位置，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的主元行是第 1 行和第 2 行，即行空间 $\text{Row}(\boldsymbol{A})$ 可以写作

$$\text{Row}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{[1,2,1], [-1,-1,1]\}$$

解法 2 依次作初等行变换：$R_2 + R_1$ (第 1 行加到第 2 行)，$R_3 - R_1, R_3 - 2R_2$，则变换结果为

$$\boldsymbol{B}_r = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

得到两个线性无关的行向量 $\boldsymbol{r}_1 = [1,2,1], \boldsymbol{r}_2 = [0,1,2]$，它们组成行空间 $\text{Row}(\boldsymbol{A})$ 的基向量，即

$$\text{Row}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{[1,2,1], [0,1,2]\}$$

而矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的主元列为第 1 列和第 2 列，它们组成列空间 $\text{Col}(\boldsymbol{A})$ 的基，即

$$\text{Col}(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\left\{\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 2 \\ -1 \\ 4 \end{bmatrix}\right\}$$

事实上，两种解法的结果等价，因为对解法 2 求得的列空间的基作初等列变换，有

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 \\ -1 & -1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix} \xrightarrow{-C_1+C_2} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 0 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \xrightarrow{C_2-C_1} \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \\ 2 & 3 \end{bmatrix} \xrightarrow{C_1 \leftrightarrow C_2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 3 & 2 \end{bmatrix}$$

与解法 1 的列空间基向量结果相同。类似地，可以证明，解法 1 和解法 2 得到的行空间的基向量也等价。

由于初等行变换与初等列变换得到的行空间与列空间的基向量等价，故任意选择一种初等变换均可。习惯上使用初等行变换。不过，若矩阵的列数明显少于行数时，初等列变换需要较少的次数。

例 9.2.2 已知 3×5 矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -4 & -8 & -7 & 1 & -1 \\ 1 & 2 & 2 & 3 & -1 \\ 2 & 4 & 3 & -7 & 3 \end{bmatrix}$$

经过初等行变换，该矩阵可化为阶梯型矩阵

$$\boldsymbol{A} \sim \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 2 & 3 & -1 \\ 0 & 0 & 1 & 13 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

由其主元位置所在的行，即可得到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间为

$$\text{Row}\,(\boldsymbol{A}) = \text{Span}\{[1,2,2,3,-1], [0,0,1,13,-5]\}$$

即行空间的两个基向量为 $[1,2,2,3,-1]$ 和 $[0,0,1,13,-5]$。

又由 $\boldsymbol{B}$ 的主元位置知，原矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的主元列为第 1 列和第 3 列，故有

$$\mathrm{Col}\,(\boldsymbol{A}) = \mathrm{Span}\left\{\begin{bmatrix} -4 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -7 \\ 2 \\ 3 \end{bmatrix}\right\}$$

为了求 $\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$，再使用初等行变换，将阶梯型矩阵 $\boldsymbol{B}$ 变为简约阶梯型矩阵

$$\boldsymbol{A} \sim \boldsymbol{B} \sim \boldsymbol{C} = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 & -23 & 9 \\ 0 & 0 & 1 & 13 & -5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

于是，齐次方程 $\boldsymbol{Cx} = \boldsymbol{0}$ 为

$$\left.\begin{aligned} x_1 + 2x_2 - 23x_4 + 9x_5 = 0 \\ x_3 + 13x_4 - 5x_5 = 0 \end{aligned}\right\} \tag{1}$$

其特解 $\boldsymbol{x} = [x_1, x_2, x_3, x_4, x_5]^{\mathrm{T}}$ 为

$$\boldsymbol{x} = [-2, 1, 0, 0, 0]^{\mathrm{T}} \quad 或 \quad \boldsymbol{x} = [-11, 1, 5, 0, 1]^{\mathrm{T}}, \quad \cdots$$

因此，简约阶梯型矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的零空间 $\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$ 可以写作

$$\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{C}) = \mathrm{Span}\left\{\begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}\right\} \quad 或 \quad \mathrm{Null}\,(\boldsymbol{C}) = \mathrm{Span}\left\{\begin{bmatrix} -11 \\ 1 \\ 5 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right\}, \cdots$$

由于 $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{C}$ 为行等价矩阵，故 $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{0}$ 与 $\boldsymbol{Cx} = \boldsymbol{0}$ 等价，即 $\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A}) = \mathrm{Null}\,(\boldsymbol{C})$，故

$$\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A}) = \mathrm{Span}\left\{\begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}\right\} \quad 或 \quad \mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A}) = \mathrm{Span}\left\{\begin{bmatrix} -11 \\ 1 \\ 5 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}\right\}, \quad \cdots$$

容易验证，零空间 $\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$ 的基向量 $[-2, 1, 0, 0, 0]^{\mathrm{T}}$ (或 $[-11, 1, 5, 0, 1]^{\mathrm{T}}$) 与行空间 $\mathrm{Row}\,(\boldsymbol{A})$ 的基向量 $[1, 2, 2, 3, -1]$ 和 $[0, 0, 1, 13, -5]$ 分别正交，因此 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}) = (\mathrm{Row}(\boldsymbol{A}))^{\perp}$。就是说，列向量 $[-2, 1, 0, 0, 0]^{\mathrm{T}}$ 和 $[-11, 1, 5, 0, 1]^{\mathrm{T}}$ 确实分别是零空间 $\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$ 的基向量。

顺便指出，零空间 $\mathrm{Null}\,(\boldsymbol{A})$ 的基向量 $\boldsymbol{x}$ 也可以直接根据与行空间 $\mathrm{Row}(\boldsymbol{A})$ 的基向量的正交关系求出：

$$\left.\begin{aligned} x_1 + 2x_2 + 2x_2 + 3x_4 - x_5 = 0 \\ x_3 + 13x_4 - 5x_5 = 0 \end{aligned}\right\} \tag{2}$$

容易证明，齐次方程 (1) 和 (2) 实际上是等价的。

下面的定理描述了一个 $m \times n$ 矩阵的秩与其零空间维数之间的关系，称为秩定理 (rank theorem)。

定理 9.2.8 矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的列空间与行空间的维数相等。这个共同的维数就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩 $\text{rank}(\boldsymbol{A})$，它与零空间维数之间有下列关系：

$$\text{rank}(\boldsymbol{A})+\dim[\text{Null}(\boldsymbol{A})]=n \tag{9.2.16}$$

证明 根据矩阵秩的定义式 (9.2.15) 知，$\text{rank}(\boldsymbol{A})$ 就是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 中线性无关列 (即主元列) 的个数。即是说，$\text{rank}(\boldsymbol{A})$ 是经过初等行变换得到的阶梯型矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的主元的个数。由于在每一个主元位置，阶梯型矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行都是线性无关的非零行，并且这些行构成矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间，所以矩阵的秩 $\text{rank}(\boldsymbol{A})$ 也是行空间 $\text{Row}(\boldsymbol{A})$ 的维数。由定理 9.2.1 知，

$$\begin{aligned}\text{rank}(\boldsymbol{A})+\dim[\text{Null}(\boldsymbol{A})]&=\text{rank}(\boldsymbol{A})+\dim[(\text{Row}(\boldsymbol{A}))^{\perp}]\\&=\dim[\text{Row}(\boldsymbol{A})]+\dim[(\text{Row}(\boldsymbol{A}))^{\perp}]\end{aligned}$$

本定理成立。 ■

下面的定理表明，矩阵的 QR 分解也可以用于构造列空间的基向量。

定理 9.2.9 若 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$ 是一个满列秩矩阵 $\boldsymbol{A}\in R^{m\times n}$ 的 QR 分解，并且 $\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_n]$ 和 $\boldsymbol{Q}=[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_m]$ 是列分块的，则

$$\text{Span}\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}=\text{Span}\{\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_k\},\qquad k=1,2,\cdots,n$$

特别地，若 $\boldsymbol{Q}=[\boldsymbol{Q}_1,\boldsymbol{Q}_2]$，其中，$\boldsymbol{Q}_1$ 是 $\boldsymbol{Q}$ 的前 n 列组成的分块，$\boldsymbol{Q}_2$ 是 $\boldsymbol{Q}$ 的其他列组成的分块，则

$$\text{Range}(\boldsymbol{A})=\text{Range}(\boldsymbol{Q}_1),\quad (\text{Range}(\boldsymbol{A}))^{\perp}=\text{Range}(\boldsymbol{Q}_2)$$

并且 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{Q}_1\boldsymbol{R}_1$，$\boldsymbol{R}_1=\boldsymbol{R}(1:n,1:n)$，即 $\boldsymbol{R}_1$ 是 $\boldsymbol{R}$ 的左上方 $n\times n$ 方块。

证明 比较 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{QR}$ 左右两边的第 k 列，可以得出结论：

$$\boldsymbol{a}_k=\sum_{i=1}^{k}r_{ik}\boldsymbol{q}_i\ \in\ \text{Span}\{\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_k\}$$

上式表明，$\text{Span}\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}\subseteq\text{Span}\{\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_k\}$。然而，由于 $\text{rank}(\boldsymbol{A})=n$，故 $\text{Span}\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k\}$ 具有维数 k，从而有 $\text{Span}\{\boldsymbol{a}_1,\boldsymbol{a}_2,\cdots,\boldsymbol{a}_k)=\text{Span}\{\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_k\}$。定理的剩余部分可以直接得出。 ■

9.2.3 基本空间的标准正交基构造：奇异值分解法

初等变换法得到的只是线性无关的基向量。然而，在很多应用中，希望获得已知矩阵的列空间、行空间和零空间的正交基。对线性无关的基向量，使用 Gram-Schmidt 正交化，可以实现这些要求。但是，更方便的方法是利用矩阵的奇异值分解。

令秩 $\text{rank}(\boldsymbol{A})=r$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 具有以下奇异值分解：

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma V}^{\text{H}} \tag{9.2.17}$$

式中

$$\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{U}_r,\tilde{\boldsymbol{U}}_r],\quad \boldsymbol{V}=[\boldsymbol{V}_r,\tilde{\boldsymbol{V}}_r],\quad \boldsymbol{\Sigma}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_r & \boldsymbol{O}_{r\times(n-r)}\\ \boldsymbol{O}_{(m-r)\times(n-r)} & \boldsymbol{O}_{(n-r)\times(n-r)}\end{bmatrix}$$

这里，$\boldsymbol{U}_r$ 和 $\tilde{\boldsymbol{U}}_r$ 分别为 $m\times r$ 和 $m\times(m-r)$ 矩阵，$\boldsymbol{V}_r$ 和 $\tilde{\boldsymbol{V}}_r$ 分别为 $n\times r$ 和 $n\times(n-r)$ 矩阵，并且 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\sigma_1,\sigma_2,\cdots,\sigma_r)$。

显然，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解可简化为

$$\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{V}_r^{\mathrm{H}}=\sum_{i=1}^{r}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}} \tag{9.2.18}$$

$$\boldsymbol{A}^{H}=\boldsymbol{V}_r\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{H}}=\sum_{i=1}^{r}\sigma_i\boldsymbol{v}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}} \tag{9.2.19}$$

下面分别讨论列空间、行空间和零空间的标准正交基的构造。

1\. 列空间的标准正交基构造

将式 (9.2.18) 代入值域 Range($\boldsymbol{A}$) 的定义式，易得

$$\begin{aligned}\mathrm{Range}(\boldsymbol{A})&=\{\boldsymbol{y}\in C^m:\ \boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x},\quad \boldsymbol{x}\in C^n\}\\&=\left\{\boldsymbol{y}\in C^m:\ \boldsymbol{y}=\sum_{i=1}^{r}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x},\quad \boldsymbol{x}\in C^n\right\}\\&=\left\{\boldsymbol{y}\in C^m:\ \boldsymbol{y}=\sum_{i=1}^{r}\boldsymbol{u}_i(\sigma_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}),\quad \boldsymbol{x}\in C^n\right\}\\&=\left\{\boldsymbol{y}\in C^m:\ \boldsymbol{y}=\sum_{i=1}^{r}\alpha_i\boldsymbol{u}_i,\quad \alpha_i=\sigma_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\in C\right\}\\&=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r\}\end{aligned}$$

利用值域与列空间的等价关系，即有

$$\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Range}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r\}$$

这表明，与 r 个非零奇异值对应的左奇异向量 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r$ 构成列空间 Col($\boldsymbol{A}$) 的一组基。

2\. 行空间的标准正交基构造

计算复共轭转置矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 的值域，得

$$\begin{aligned}\mathrm{Range}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})&=\{\boldsymbol{y}\in C^n:\ \boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x},\quad \boldsymbol{x}\in C^m\}\\&=\left\{\boldsymbol{y}\in C^n:\ \boldsymbol{y}=\sum_{i=1}^{r}\sigma_i\boldsymbol{v}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x},\quad \boldsymbol{x}\in C^m\right\}\\&=\left\{\boldsymbol{y}\in C^n:\ \boldsymbol{y}=\sum_{i=1}^{r}\alpha_i\boldsymbol{v}_i,\quad \alpha_i=\sigma_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\in C\right\}\\&=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_r\}\end{aligned}$$

从而有

$$\mathrm{Row}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Range}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{v}_1\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_r\}$$

即与 r 个非零奇异值对应的右奇异向量 $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_r$ 是行空间 $\mathrm{Row}(\boldsymbol{A})$ 的一组基。

3. 零空间的标准正交基构造

由于假定矩阵的秩为 r，故零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})$ 的维数等于 $n-r$。因此，我们需要寻找 $n-r$ 个线性无关的标准正交向量作为零空间的标准正交基。为此，考虑满足 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的向量。由奇异向量的性质得 $\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v}_j=0,\ \forall\, i=1,2,\cdots,r,\ j=r+1,r+2,\cdots,n$。由此知

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{v}_j=\sum_{i=1}^{r}\sigma_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{v}_j=\boldsymbol{0},\qquad \forall\, j=r+1,r+2,\cdots,n$$

由于与零奇异值对应的 $n-r$ 个右奇异向量 $\boldsymbol{v}_{r+1},\boldsymbol{v}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{v}_n$ 线性无关，并且满足 $\boldsymbol{Ax}=\boldsymbol{0}$ 的条件，故它们组成了零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})$ 的基，即有

$$\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{v}_{r+1},\boldsymbol{v}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{v}_n\}$$

类似地，有

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_j=\sum_{i=1}^{r}\sigma_i\boldsymbol{v}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_j=\boldsymbol{0},\qquad \forall\, j=r+1,r+2,\cdots,m$$

由于 $m-r$ 个右奇异向量 $\boldsymbol{u}_{r+1},\boldsymbol{u}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{u}_m$ 线性无关，并且满足 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$ 的条件，故它们组成了零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 的基，即有

$$\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_{r+1},\boldsymbol{u}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{u}_m\}$$

由于矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}$ 的左奇异向量矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和右奇异向量矩阵 $\boldsymbol{V}$ 为酉矩阵，所以上述方法实际上分别提供了 $\boldsymbol{A}$ 的列空间、行空间和零空间的标准正交基。总结以上讨论，对于秩为 r 的复矩阵 $\boldsymbol{A}\in C^{m\times n}$，有以下结论：

(1) 与非零奇异值对应的 r 个左奇异向量 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r$ 是列空间 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})$ 的标准正交基，即有

$$\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r\}\tag{9.2.20}$$

(2) 与零奇异值对应的 $m-r$ 个左奇异向量 $\boldsymbol{u}_{r+1},\boldsymbol{u}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{u}_m$ 是零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 的标准正交基，即

$$\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=(\mathrm{Col}(\boldsymbol{A}))^{\perp}=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_{r+1},\boldsymbol{u}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{u}_m\}\tag{9.2.21}$$

(3) 与非零奇异值对应的 r 个右奇异向量 $\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_r$ 是行空间 $\mathrm{Row}(\boldsymbol{A})$ 的标准正交基，即

$$\mathrm{Row}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{v}_1,\boldsymbol{v}_2,\cdots,\boldsymbol{v}_r\}\tag{9.2.22}$$

(4) 与零奇异值对应的 $n-r$ 个右奇异向量 $\boldsymbol{v}_{r+1},\boldsymbol{v}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{v}_n$ 是零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})$ 的标准正交基，即

$$\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})=(\mathrm{Row}(\boldsymbol{A}))^{\perp}=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{v}_{r+1},\boldsymbol{v}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{v}_n\}\tag{9.2.23}$$

令 U_H 是与矩阵 H 的 p 个非零奇异值对应的左奇异向量组成的矩阵。类似地，U_S 是与矩阵 S 的 q 个非零奇异值对应的左奇异向量组成的矩阵，其中，假设 $p > q$。Golub 与 Van Loan [184] 证明了，所有主角都可以利用奇异值分解计算：由于 $\text{Span}(U_H) = \text{Range}(H)$ 和 $\text{Span}(U_S) = \text{Range}(S)$，故子空间 $\text{Range}(H)$ 和 $\text{Range}(S)$ 之间的第 i 个主角由

$$\phi_i = \arccos \lambda_i, \quad i = 1, 2, \cdots, q \tag{9.2.24}$$

给出，式中，λ_i 是乘积矩阵 $U_H^{\mathrm{H}} U_S$ 的第 i 个奇异值。

QR 分解是构造矩阵 A 的列空间的正交基的另外一种方法 [470]。令 $n \times n$ 矩阵 $A = [a_1, a_2, \cdots, a_n]$ 非奇异，并令 $Q = [q_1, q_2, \cdots, q_n]$。由 $a_1 = r_{11} q_1, a_2 = r_{12} q_1 + r_{22} q_2$ 可以写出一般形式

$$a_k = r_{1k} q_1 + r_{2k} q_2 + \cdots + r_{kk} q_k, \quad k = 1, 2, \cdots, n$$

由此得 $\text{Span}\{a_1\} = \text{Span}\{q_1\}$，$\text{Span}\{a_1, a_2\} = \text{Span}\{q_1, q_2\}$ 以及一般形式

$$\text{Span}\{a_1, a_2, \cdots, a_k\} = \text{Span}\{q_1, q_2, \cdots, q_k\}, \quad k = 1, 2, \cdots, n$$

最后有 $\text{Col}(A) = \text{Col}(Q)$。换言之，酉矩阵 Q 的列向量是矩阵 A 的列空间的一组标准正交基。

9.2.4　构造两个零空间交的标准正交基

上面介绍了使用矩阵奇异值分解，构造单个零空间 $\text{Null}(A)$ 的标准正交基的方法。现在考虑对给定的两个矩阵 $A \in C^{m \times n}$ 和 $B \in C^{p \times n}$，如何构造零空间的交 $\text{Null}(A) \cap \text{Null}(B)$ 的标准正交基。

显然，若令

$$C = \begin{bmatrix} A \\ B \end{bmatrix} \in C^{(m+p) \times n}$$

则

$$Cx = 0 \iff Ax = 0 \quad 和 \quad Bx = 0$$

即 C 的零空间等于 A 的零空间与 B 的零空间的交：

$$\text{Null}(C) = \text{Null}(A) \cap \text{Null}(B)$$

这表明，若 $(m+p) \times n$ 矩阵 C 的秩为 $r = \text{rank}(C)$，则它的右奇异向量 $v_1, v_2, \cdots, v_n$ 中，与 $n-r$ 个零奇异值对应的右奇异向量 $v_{r+1}, v_{r+2}, \cdots, v_n$ 构成零空间的交 $\text{Null}(A) \cap \text{Null}(B)$ 的标准正交基。但是，这涉及 $(m+p) \times n$ 矩阵 C 的奇异值分解。

在奇异值分解中，总是希望将一个较大维数的矩阵奇异值分解问题能够分解为两个或多个较小维数的奇异值分解子问题。下面的定理为计算 $\text{Null}(A) \cap \text{Null}(B)$ 的标准正交基提供了这样一种更加经济的方法。

定理 9.2.10 令 $\boldsymbol{A} \in R^{m\times n}$，并且 $\{\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \cdots, \boldsymbol{z}_t\}$ 是零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 的一组正交基。记 $\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{z}_1, \boldsymbol{z}_2, \cdots, \boldsymbol{z}_t]$，并定义 $\{\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \cdots, \boldsymbol{w}_q\}$ 是零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{BZ})$ 的一组正交基，其中，$\boldsymbol{B} \in R^{p\times n}$。若 $\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \cdots, \boldsymbol{w}_q]$，则 $\boldsymbol{ZW}$ 的列向量构成零空间的交 $\text{Null}(\boldsymbol{A}) \cap \boldsymbol{B}$ 的一组正交基。

证明 参见文献 [184, p.583]。

给定矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 和 $\boldsymbol{B}_{p\times n}$，定理 9.2.10 给出了构造 $\text{Null}(\boldsymbol{A}) \cap \text{Null}(\boldsymbol{B})$ 的正交基的如下方法：

(1) 计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}_A \boldsymbol{\Sigma}_A \boldsymbol{V}_A^{\text{T}}$，判断矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的有效秩 r，进而得到零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{A})$ 的正交基 $\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{r}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n$，其中，$\boldsymbol{v}_i$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的右奇异向量。令 $\boldsymbol{Z} = [\boldsymbol{v}_{r+1}, \boldsymbol{v}_{r+2}, \cdots, \boldsymbol{v}_n]$。

(2) 计算矩阵 $\boldsymbol{C}_{p\times(n-r)} = \boldsymbol{BZ}$ 和它的奇异值分解 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{U}_C \boldsymbol{\Sigma}_C \boldsymbol{V}_C^{\text{T}}$，判断其有效秩 q，进而得到零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{BZ})$ 的正交基 $\boldsymbol{w}_{q+1}, \boldsymbol{w}_{q+2}, \cdots, \boldsymbol{w}_{n-r}$，其中，$\boldsymbol{w}_i$ 是矩阵 $\boldsymbol{C} = \boldsymbol{BZ}$ 的右奇异向量。令 $\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_{q+1}, \boldsymbol{w}_{q+2}, \cdots, \boldsymbol{w}_{n-r}]$。

(3) 计算矩阵 $\boldsymbol{ZW}$，其列向量即为零空间的交 $\text{Null}(\boldsymbol{A}) \cap \text{Null}(\boldsymbol{B})$ 的正交基 (由于 $\boldsymbol{Z}$ 和 $\boldsymbol{W}$ 分别是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{BZ}$ 的右奇异向量组成的矩阵，故 $\boldsymbol{ZW}$ 具有正交性)。

9.3 子空间方法

前面介绍了矩阵的列空间、行空间与零空间。本节讨论子空间分析方法及其在工程和信号处理中的应用。由于在工程应用中，多数情况下使用列空间，因此本章今后将以矩阵的列空间作为主要讨论对象。

观测数据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 不可避免地存在观测误差或噪声。令

$$\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A} + \boldsymbol{W} = [\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n] \in C^{m\times n} \tag{9.3.1}$$

为观测数据矩阵，其中，$\boldsymbol{x}_i \in C^{m\times 1}$。在信号处理和系统科学等领域中，观测数据矩阵的列空间

$$\text{Span}(\boldsymbol{X}) = \text{Span}\{\boldsymbol{x}_1, \boldsymbol{x}_2, \cdots, \boldsymbol{x}_n\} \tag{9.3.2}$$

称为观测数据空间。

9.3.1 信号子空间与噪声子空间

定义相关矩阵

$$\boldsymbol{R}_X = \text{E}\{\boldsymbol{X}^{\text{H}}\boldsymbol{X}\} = \text{E}\{(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{W})^{\text{H}}(\boldsymbol{A} + \boldsymbol{W})\} \tag{9.3.3}$$

假设误差矩阵 $\boldsymbol{W} = [\boldsymbol{w}_1, \boldsymbol{w}_2, \cdots, \boldsymbol{w}_n]$ 与真实数据矩阵 $\boldsymbol{A}$ 统计不相关，则

$$\boldsymbol{R}_X = \text{E}\{\boldsymbol{X}^{\text{H}}\boldsymbol{X}\} = \text{E}\{\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A}\} + \text{E}\{\boldsymbol{W}^{\text{H}}\boldsymbol{W}\} \tag{9.3.4}$$

令 $\boldsymbol{R}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\}$ 和 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}\}=\sigma_w^2\boldsymbol{I}$ (即各观测噪声相互统计不相关，并且具有相同的方差 σ_w^2)，则

$$\boldsymbol{R}_X=\boldsymbol{R}+\sigma_w^2\boldsymbol{I}$$

令 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=r$，则矩阵 $\boldsymbol{R}=\mathrm{E}\{\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\}$ 的特征值分解

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Lambda}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}+\sigma_w^2\boldsymbol{I}=\boldsymbol{U}(\boldsymbol{\Lambda}+\sigma_w^2\boldsymbol{I})\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Pi}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$$

式中

$$\boldsymbol{\Pi}=\boldsymbol{\Sigma}+\sigma_w^2\boldsymbol{I}=\mathrm{diag}(\sigma_1^2+\sigma_w^2,\cdots,\sigma_r^2+\sigma_w^2,\sigma_w^2,\cdots,\sigma_w^2)$$

其中，$\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\sigma_1^2,\cdots,\sigma_r^2,0,\cdots,0)$，且 $\sigma_1^2\geqslant\sigma_2^2\geqslant\cdots\geqslant\sigma_r^2$ 为真实自相关矩阵 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\}$ 的非零特征值。

显然，如果信噪比足够大，即 σ_r^2 比 σ_w^2 明显大，则将含噪声的自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_X$ 的前 r 个大特征值

$$\lambda_1=\sigma_1^2+\sigma_w^2,\ \lambda_2=\sigma_2^2+\sigma_w^2,\ \cdots,\ \lambda_r=\sigma_r^2+\sigma_w^2$$

称为主特征值 (principal eigenvalue)，而将剩余的 $n-r$ 个小特征值

$$\lambda_{r+1}=\sigma_w^2,\ \lambda_{r+2}=\sigma_w^2,\ \cdots,\ \lambda_n=\sigma_w^2$$

称为次特征值 (minor eigenvalue)。

这样，自相关矩阵 $\boldsymbol{R}_X$ 的特征值分解即可写成

$$\boldsymbol{R}_X=[\boldsymbol{U}_s,\boldsymbol{U}_n]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_s & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{\Sigma}_n\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_s^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{U}_n^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}=\boldsymbol{S}\boldsymbol{\Sigma}_s\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}+\boldsymbol{G}\boldsymbol{\Sigma}_n\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}} \tag{9.3.5}$$

式中

$$\begin{aligned}\boldsymbol{S}&\stackrel{\mathrm{def}}{=}[\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\cdots,\boldsymbol{s}_r]=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r]\\ \boldsymbol{G}&\stackrel{\mathrm{def}}{=}[\boldsymbol{g}_1,\boldsymbol{g}_2,\cdots,\boldsymbol{g}_{n-r}]=[\boldsymbol{u}_{r+1},\boldsymbol{u}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{u}_n]\\ \boldsymbol{\Sigma}_s&=\mathrm{diag}(\sigma_1^2+\sigma_w^2,\sigma_2^2+\sigma_w^2,\cdots,\sigma_r^2+\sigma_w^2)\\ \boldsymbol{\Sigma}_n&=\mathrm{diag}(\sigma_w^2,\sigma_w^2,\cdots,\sigma_w^2)\end{aligned}$$

因此，$m\times r$ 酉矩阵 $\boldsymbol{S}$ 和 $m\times(n-r)$ 酉矩阵 $\boldsymbol{G}$ 分别是与 r 个主特征值和 $n-r$ 个次特征值对应的特征向量构成的矩阵。

定义 9.3.1　令 $\boldsymbol{S}$ 是与观测数据的自相关矩阵的 r 个大特征值 $\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r$ 对应的特征向量矩阵，其列空间 $\mathrm{Span}(\boldsymbol{S})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_r\}$ 称为观测数据空间 $\mathrm{Span}(\boldsymbol{X})$ 的信号子空间，而与另外 $n-r$ 个次特征值对应的特征向量矩阵 $\boldsymbol{G}$ 的列空间 $\mathrm{Span}(\boldsymbol{G})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_{r+1},\boldsymbol{u}_{r+2},\cdots,\boldsymbol{u}_n\}$ 称为观测数据空间的噪声子空间。

下面分析信号子空间和噪声子空间的几何意义。由子空间的构造方法及酉矩阵的特点知，信号子空间与噪声子空间正交，即

$$\mathrm{Span}\{\boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_2,\cdots,\boldsymbol{s}_r\}\perp\mathrm{Span}\{\boldsymbol{g}_1,\boldsymbol{g}_2,\cdots,\boldsymbol{g}_{n-r}\} \tag{9.3.6}$$

由于 $\boldsymbol{U}$ 是酉矩阵，故

$$\boldsymbol{U}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}=[\boldsymbol{S},\ \boldsymbol{G}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}=\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}+\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{I}$$

即有

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}} \tag{9.3.7}$$

定义信号子空间上的投影矩阵

$$\boldsymbol{P}_s\overset{\text{def}}{=}\boldsymbol{S}\langle\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}\rangle^{-1}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}} \tag{9.3.8}$$

式中，矩阵内积 $\langle\boldsymbol{S},\boldsymbol{S}\rangle=\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{I}$。于是，$\boldsymbol{P}_s\boldsymbol{x}$ 可视为向量 $\boldsymbol{x}$ 在信号子空间上的投影，而 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_s)\boldsymbol{x}$ 则代表向量 $\boldsymbol{x}$ 在信号子空间上的正交投影。由 $\langle\boldsymbol{G},\boldsymbol{G}\rangle=\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G}=\boldsymbol{I}$ 得噪声子空间上的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_n=\boldsymbol{G}\langle\boldsymbol{G},\boldsymbol{G}\rangle^{-1}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}$。因此，常将

$$\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_s \tag{9.3.9}$$

称为信号子空间的正交投影矩阵。

子空间应用具有以下几个特点 [485]：

(1) 只需要少数几个奇异向量或者特征向量。由于矩阵 $\boldsymbol{A}_{m\times n}$ 的大奇异值 (或者特征值) 个数比小奇异值 (或者特征值) 个数小，所以使用维数比较小的信号子空间比噪声子空间更有效。

(2) 在很多应用中，并不需要奇异值或者特征值，而只需知道矩阵的秩以及奇异向量或者特征向量即可。

(3) 多数情况下，并不需要准确知道奇异向量或者特征向量，而只需知道张成信号子空间或者噪声子空间的基向量即可。

9.3.2 子空间方法 1：多重信号分类 (MUSIC)

下面讨论如何利用子空间进行多个信号分类。

令 $\boldsymbol{x}(t)$ 是在第 t 个快拍观察到的数据向量。在阵列信号处理和空间谱估计中，$\boldsymbol{x}(t)=[x_1(t),x_2,\cdots,x_n(t)]^{\mathrm{T}}$ 由 n 个阵元 (天线或传感器) 的观测数据组成。在时域谱估计中，向量 $\boldsymbol{x}(t)=[x(t),x(t-1),\cdots,x(t-n-1)]^{\mathrm{T}}$ 由连续的 n 个观察数据样本组成。

假定数据向量 $\boldsymbol{x}(t)$ 是 r 个窄带信号入射到 n 个阵元组成的阵列的观察数据向量或者是 r 个不相干的复谐波的叠加，即

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x}(t)&=\sum_{i=1}^{r}s_i(t)\boldsymbol{a}(\omega_i)+\boldsymbol{v}(t)\\&=\boldsymbol{A}\boldsymbol{s}(t)+\boldsymbol{n}(t)\end{aligned} \tag{9.3.10}$$

式中，$\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{a}(\omega_1),\boldsymbol{a}(\omega_2),\cdots,\boldsymbol{a}(\omega_r)]$ 为确定性 $n\times r$ 阵列响应矩阵，$\boldsymbol{a}(\omega_i)=[1,\mathrm{e}^{\mathrm{j}\omega_i},\cdots,\mathrm{e}^{\mathrm{j}(n-1)\omega_i}]^{\mathrm{T}}$ 为方向向量或者频率向量；$\boldsymbol{s}(t)=[s_1(t),s_2(t),\cdots,s_r(t)]^{\mathrm{T}}$ 为随机信号向量，其

均值为零向量，协方差矩阵为 $\boldsymbol{R}_s = \mathrm{E}\{\boldsymbol{s}(t)\boldsymbol{s}^{\mathrm{H}}(t)\}$；而 $\boldsymbol{v}(t) = [v_1(t), v_2(t), \cdots, v_n(t)]^{\mathrm{T}}$ 为加性噪声向量，其各个分量为高斯白噪声，它们具有零均值和相同的方差 σ^2。在谐波恢复中，参数 ω_i 为复谐波的频率；在阵列信号处理中，ω_i 是一空间参数：

$$\omega_i = 2\pi\frac{d}{\lambda}\sin\theta_i$$

式中，d 为相邻两个阵元之间的距离 (假定阵元等间距排列成一直线)，λ 为波长，且 θ_i 表示第 i 个窄带信号达到阵元的入射方向，简称波达方向。

现在的问题是：根据 N 个快拍的观测数据向量 $\boldsymbol{x}(t)\,(t = 1, 2, \cdots, N)$ 估计 r 个参数 ω_i。这相当于对 r 个混合信号进行分类，简称多重信号分类。

假定噪声向量 $\boldsymbol{v}(t)$ 与信号向量 $\boldsymbol{s}(t)$ 统计不相关，并令观测数据向量的协方差矩阵 $\boldsymbol{R}_{xx}$ 的特征值分解为

$$\boldsymbol{R}_{xx} = \boldsymbol{U\Sigma U}^{\mathrm{H}} = [\boldsymbol{S}, \boldsymbol{G}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \sigma^2\boldsymbol{I}_{n-r}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix} \tag{9.3.11}$$

式中，$\boldsymbol{\Sigma}$ 包含了 r 个大特征值，它们比 σ^2 明显大。

考查

$$\boldsymbol{R}_{xx}\boldsymbol{G} = [\boldsymbol{S}, \boldsymbol{G}]\boldsymbol{\Sigma}\begin{bmatrix}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\boldsymbol{G} = [\boldsymbol{S}, \boldsymbol{G}]\boldsymbol{\Sigma}\begin{bmatrix}\boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{I}\end{bmatrix} = \sigma^2\boldsymbol{G} \tag{9.3.12}$$

又由 $\boldsymbol{R}_{xx} = \boldsymbol{APA}^{\mathrm{H}} + \sigma^2\boldsymbol{I}$ 有 $\boldsymbol{R}_{xx}\boldsymbol{G} = \boldsymbol{APA}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G} + \sigma^2\boldsymbol{G}$，利用式 (9.3.12) 的结果，立即得到

$$\boldsymbol{APA}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G} = \boldsymbol{O}$$

进而有

$$\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{APA}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G} = \boldsymbol{O} \tag{9.3.13}$$

众所周知，$\boldsymbol{t}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Qt} = 0$ 当且仅当 $\boldsymbol{t} = \boldsymbol{0}$，故式 (9.3.13) 成立的充分必要条件是

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{G} = \boldsymbol{O} \tag{9.3.14}$$

将 $\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{a}(\omega_1), \cdots, \boldsymbol{a}(\omega_p)]$ 代入式 (9.3.14)，即有

$$\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(\omega)\boldsymbol{G} = \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}, \quad \omega = \omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_p \tag{9.3.15}$$

显然，当 $\omega \neq \omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_p$ 时，$\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(\omega)\boldsymbol{G} \neq \boldsymbol{0}^{\mathrm{T}}$。

将式 (9.3.15) 改写成标量形式，可以定义一种类似于功率谱的函数：

$$P(\omega) = \frac{1}{\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(\omega)\boldsymbol{GG}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{a}(\omega)} \tag{9.3.16}$$

上式取峰值的 p 个 ω 值 $\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_p$ 给出 p 个信号的波达方向 $\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_p$。

由于式 (9.3.16) 定义的函数 $P(\omega)$ 描述了空间参数 (即波达方向) 的分布，故常称之为空间谱。由于它能够对多个空间信号进行识别 (即分类) 故这种方法称为多重信号分类

方法，简称 MUSIC (multiple signal classification) 方法，它是 Schmidt[406]，Biemvenu 及 Kopp[42] 于 1979 年独立提出的。后来，Schmidt 于 1986 年重新发表了他的论文 [407]。

将式 (9.3.9) 代入式 (9.3.16)，又可得到

$$P(\omega)=\frac{1}{\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}(\omega)(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{a}(\omega)} \tag{9.3.17}$$

因为 $\boldsymbol{G}\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}$ 和 $\boldsymbol{S}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}$ 分别代表信号子空间和噪声子空间，故式 (9.3.16) 和式 (9.3.17) 可分别视为噪声子空间方法和信号子空间方法。

在实际应用中，通常将 ω 划分为数百个等间距的单位，得到

$$\omega_i=2\pi i\Delta f \tag{9.3.18}$$

例如取 $\Delta f=\frac{0.5}{500}=0.001$，然后将每个 ω_i 值代入式 (9.3.16) 或式 (9.3.17) 求出所有峰值对应的 ω 值。因此，MUSIC 算法需要在频率轴上进行全域搜索，计算量比较大。另外，执行 MUSIC 算法是选择噪声子空间还是信号子空间方式，决定于 $\boldsymbol{G}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 中哪一个具有更小的维数。除了计算量有所不同外，这两种方式并没有本质上的区别。

为了改进 MUSIC 算法的性能，已提出了好几种变型，例如基于最大似然法的改进 MUSIC 算法 [412]、解相干 MUSIC 算法和求根 MUSIC 算法 [26] 等。有关这些变型的详细讨论，可参考文献 [524]。

9.3.3 子空间方法 2：方程 $\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 求解

在许多工程问题中，常常会遇到下面的矩阵方程：

$$\boldsymbol{X}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{S} \tag{9.3.19}$$

式中，$\boldsymbol{X}_{N\times M}$ 为复矩阵，其元素为观测数据；而复矩阵 $\boldsymbol{A}_{N\times d}$ 和 $\boldsymbol{S}_{d\times M}$ 均未知。例如，在阵列信号处理中，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 分别代表阵列的响应矩阵和希望恢复的信号矩阵。又如，在盲信号分离中，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{S}$ 分别代表信号的线性混合过程和希望分离的信号矩阵。现在希望求解上述方程，得到 $\boldsymbol{S}$。问题是：在只已知 $\boldsymbol{X}$ 的情况下，能够求出未知矩阵 $\boldsymbol{S}$ 吗？答案是肯定的，但需要假定两个条件：矩阵 $\boldsymbol{A}$ 列满秩和 $\boldsymbol{S}$ 行满秩。这两个假设条件在工程问题中往往是满足的。例如，在阵列信号处理中，矩阵 $\boldsymbol{A}$ 列满秩意味着各个信号的波达方向是独立的，而矩阵 $\boldsymbol{S}$ 行满序则要求各个信号是独立发射的。

假定 N 为数据长度，d 为源信号个数，M 为传感器个数，通常取 $M\geqslant d$ 和 $N>M$。定义数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的截尾奇异值分解为

$$\boldsymbol{X}=\hat{\boldsymbol{U}}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\hat{\boldsymbol{V}}^{\mathrm{H}} \tag{9.3.20}$$

式中，$\hat{\boldsymbol{\Sigma}}$ 是包含了 d 个主要奇异值的 $d\times d$ 对角矩阵。由于 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Col}(\hat{\boldsymbol{U}})$，即矩阵 $\boldsymbol{A}$ 和 $\hat{\boldsymbol{U}}$ 二者张成同一个信号子空间，故有

$$\hat{\boldsymbol{U}}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{T} \tag{9.3.21}$$

式中，$\boldsymbol{T}$ 是一个 $d \times d$ 非奇异矩阵。

令 $\boldsymbol{W}$ 是一个 $d \times N$ 复矩阵，它代表一神经网络或者滤波器。用 $\boldsymbol{W}$ 左乘式 (9.3.19)，得

$$\boldsymbol{W}\boldsymbol{X} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$$

若调整矩阵 $\boldsymbol{W}$ 使得 $\boldsymbol{W}\boldsymbol{A} = \boldsymbol{I}_d$，则立即得到方程式 (9.3.19) 的解

$$\boldsymbol{S} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{X} \tag{9.3.22}$$

为了求 $\boldsymbol{W}$，计算

$$\boldsymbol{W}\hat{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{A}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{T}$$

立即有

$$\boldsymbol{W} = \boldsymbol{T}\hat{\boldsymbol{U}}^{\mathrm{H}} \tag{9.3.23}$$

总结以上讨论，可以得到求解方程 (9.3.19) 的以下方法：

$$\left.\begin{array}{ll} \text{数据模型} & \boldsymbol{X} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{S} \\ \text{截尾SVD} & \boldsymbol{X} = \hat{\boldsymbol{U}}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\hat{\boldsymbol{V}} \\ \text{求　　解} & \hat{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{T} \text{ 得到 } \boldsymbol{T} \\ \text{方程的解} & \boldsymbol{S} = \left(\boldsymbol{T}\hat{\boldsymbol{U}}^{\mathrm{T}}\right)\boldsymbol{X} \end{array}\right\} \tag{9.3.24}$$

由于这种方法利用了信号子空间，故称之为子空间方法。

下面结合无线通信的问题，介绍如何使用子空间方法求出非奇异矩阵 $\boldsymbol{T}$，进而得到方程 (9.3.19) 的解。

在不考虑无线通信中的多径传输的情况下，方程 (9.3.19) 中的矩阵为 [466]

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_\theta \boldsymbol{B} \tag{9.3.25}$$

式中

$$\boldsymbol{A}_\theta = [\boldsymbol{a}(\theta_1), \boldsymbol{a}(\theta_2), \cdots, \boldsymbol{a}(\theta_d)] = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \theta_1 & \theta_2 & \cdots & \theta_d \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \theta_1^{N-1} & \theta_2^{N-1} & \cdots & \theta_d^{N-1} \end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{B} = \mathrm{daig}(\beta_1, \beta_2, \cdots, \beta_d)$$

式中，θ_i 和 β_i 分别是第 i 个用户信号的波达方向和衰减系数，它们都是未知的。

定义矩阵

$$\boldsymbol{\Theta} = \mathrm{diag}(\theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_d) \tag{9.3.26}$$

和 $(M-1) \times M$ 维选择矩阵

$$\boldsymbol{J}_1 = [\boldsymbol{I}_{M-1}, \boldsymbol{0}], \qquad \boldsymbol{J}_2 = [\boldsymbol{0}, \boldsymbol{I}_{M-1}]$$

它们分别选出矩阵 $\boldsymbol{A}_\theta$ 的上面 $M-1$ 行和下面 $M-1$ 行。易知

$$(\boldsymbol{J}_1\boldsymbol{A}_\theta) = (\boldsymbol{J}_2\boldsymbol{A}_\theta)\boldsymbol{\Theta} \tag{9.3.27}$$

于是，有

$$\hat{\boldsymbol{U}} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{A}_\theta\boldsymbol{B}\boldsymbol{T} \tag{9.3.28}$$

为了求出非奇异矩阵 $\boldsymbol{T}$，用选择矩阵 $\boldsymbol{J}_1$ 和 $\boldsymbol{J}_2$ 分别左乘式 (9.3.28)，并利用式 (9.3.27)，则得

$$\hat{\boldsymbol{U}}_1 = \boldsymbol{J}_1\hat{\boldsymbol{U}} = (\boldsymbol{J}_1\boldsymbol{A}_\theta)\boldsymbol{B}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{A}'_\theta\boldsymbol{B}\boldsymbol{T} \tag{9.3.29}$$

$$\hat{\boldsymbol{U}}_2 = \boldsymbol{J}_2\hat{\boldsymbol{U}} = (\boldsymbol{J}_2\boldsymbol{A}_\theta)\boldsymbol{B}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{A}'_\theta\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{B}\boldsymbol{T} \tag{9.3.30}$$

由于 $\boldsymbol{B}$ 和 $\boldsymbol{\Theta}$ 都是对角矩阵，故 $\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{B} = \boldsymbol{B}\boldsymbol{\Theta}$，从而有

$$\hat{\boldsymbol{U}}_2 = \boldsymbol{A}'_\theta\boldsymbol{B}\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{T} = \boldsymbol{A}'_\theta\boldsymbol{B}\boldsymbol{T}\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{T} = \hat{\boldsymbol{U}}_1\boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{T}$$

或写作

$$\hat{\boldsymbol{U}}_1^\dagger\hat{\boldsymbol{U}}_2 = \boldsymbol{T}^{-1}\boldsymbol{\Theta}\boldsymbol{T} \tag{9.3.31}$$

式中，$\hat{\boldsymbol{U}}_1^\dagger = (\hat{\boldsymbol{U}}_1^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{U}}_1)^{-1}\hat{\boldsymbol{U}}_1^{\mathrm{H}}$ 是矩阵 $\hat{\boldsymbol{U}}_1$ 的广义逆矩阵。

由于 $\boldsymbol{\Theta}$ 为对角矩阵，易知式 (9.3.31) 是一典型的相似变换。因此，通过对矩阵 $\hat{\boldsymbol{U}}_1^\dagger\hat{\boldsymbol{U}}_2$ 进行相似变换，即可得到非奇异矩阵 $\boldsymbol{T}$。

以上讨论可以总结为求解矩阵方程 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A}_\theta\boldsymbol{B}\boldsymbol{S}$ 的下列算法：

(1) 计算矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的截尾奇异值分解 $\boldsymbol{X} = \hat{\boldsymbol{U}}\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\hat{\boldsymbol{V}}^{\mathrm{H}}$。

(2) 抽取矩阵 $\hat{\boldsymbol{U}}$ 的上面 $M-1$ 行组成 $\hat{\boldsymbol{U}}_1$，下面 $M-1$ 行组成 $\hat{\boldsymbol{U}}_2$。

(3) 对矩阵 $\hat{\boldsymbol{U}}_1^\dagger\hat{\boldsymbol{U}}_2$ 进行相似变换，得到非奇异矩阵 $\boldsymbol{T}$。

(4) 矩阵方程 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A}_\theta\boldsymbol{B}\boldsymbol{S}$ 的解为

$$\boldsymbol{S} = \left(\hat{\boldsymbol{U}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{T}\right)\boldsymbol{X}$$

虽然上面只是介绍了单路径传输的情况，但是求解矩阵方程 $\boldsymbol{X} = \boldsymbol{A}\boldsymbol{S}$ 的子空间方法也适用于多径传输的情况。不同的只是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的形式不同，从而使得求非奇异矩阵 $\boldsymbol{T}$ 的方法也有所不同。限于篇幅，这里不再赘述，有兴趣的读者可进一步参考文献 [466] 或文献 [523, p.365-367]。

9.3.4 子空间白化

令 $\boldsymbol{a}$ 是一个 $m\times 1$ 随机向量，具有零均值，其协方差矩阵 $\boldsymbol{C}_a = \mathrm{E}\{\boldsymbol{a}\boldsymbol{a}^{\mathrm{H}}\}$。如果 $m\times m$ 协方差矩阵 $\boldsymbol{C}_a$ 非奇异，并且不等于单位矩阵，则称随机向量 $\boldsymbol{a}$ 为有色（或非白）随机向量。

令协方差矩阵的特征值分解为 $C_a = VDV^{\mathrm{H}}$，并且矩阵

$$W = VD^{-1/2}V^{\mathrm{H}} = C_a^{-1/2} \tag{9.3.32}$$

则变换结果

$$b = Wa = C_a^{-1/2}a \tag{9.3.33}$$

的协方差矩阵等于单位矩阵，即有

$$C_b = \mathrm{E}\{bb^{\mathrm{H}}\} = WC_aW^{\mathrm{H}} = C_a^{-1/2}\mathrm{E}\{aa^{\mathrm{H}}\}[C_a^{-1/2}]^{\mathrm{H}} = I \tag{9.3.34}$$

因为 $C_a^{-1/2} = VD^{-1/2}V^{\mathrm{H}}$ 为 Hermitian 矩阵。上式表明，随机向量 b 为标准白色随机向量 (随机向量的各元素相互统计不相关，并且各方差均等于 1)。换言之，原来有色的随机向量经过线性变换 Wa 之后，变成了白色随机向量。线性变换矩阵 $W = C_a^{-1/2}$ 称为随机向量 a 的白化矩阵。

然而，若 $m \times m$ 协方差矩阵 C_a 奇异或者秩亏缺，例如 $\mathrm{rank}(C_a) = n < m$，则不存在使 $WC_aW^{\mathrm{H}} = I$ 的白化矩阵 W。此时，应该考虑在秩空间 $V = \mathrm{Range}(C_a) = \mathrm{Col}(C_a)$ 上使随机向量 a 白化。这一白化称为子空间白化 (subspace whitening)，是 Eldar 和 Opeenheim 于 2003 年提出的 [145]。

若秩亏缺的协方差矩阵 C_a 的特征值分解为

$$C_a = [V_1, V_2]\begin{bmatrix} D_{n\times n} & O_{n\times(m-n)} \\ O_{(m-n)\times n} & O_{(m-n)\times(m-n)} \end{bmatrix}\begin{bmatrix} V_1^{\mathrm{H}} \\ V_2^{\mathrm{H}} \end{bmatrix} \tag{9.3.35}$$

并令

$$W = V_1D^{-1/2}V_1^{\mathrm{H}} \tag{9.3.36}$$

则易知线性变换结果

$$b = Wa = V_1D^{-1/2}V_1^{\mathrm{H}}a \tag{9.3.37}$$

的协方差矩阵

$$\begin{aligned} C_b &= \mathrm{E}\{bb^{\mathrm{H}}\} = WC_aW^{\mathrm{H}} \\ &= V_1D^{-1/2}V_1^{\mathrm{H}}[V_1, V_2]\begin{bmatrix} D & O \\ O & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} V_1^{\mathrm{H}} \\ V_2^{\mathrm{H}} \end{bmatrix}V_1D^{-1/2}V_1^{\mathrm{H}} \\ &= [V_1D^{-1/2}, O]\begin{bmatrix} D & O \\ O & O \end{bmatrix}\begin{bmatrix} D^{-1/2}V_1^{\mathrm{H}} \\ O \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_n & O \\ O & O \end{bmatrix} \end{aligned}$$

即 $b = Wa$ 是在子空间 $\mathrm{Range}(C_a)$ 内的白色随机向量。因此，称 $W = V_1D^{-1/2}V_1^{\mathrm{H}}$ 为子空间白化矩阵。关于子空间白化及其具体实现，读者可进一步参考文献 [145]。文献 [146] 将子空间白化应用于信号检测，提出了基于正交和投影正交匹配滤波器的检测方法。

9.4 子空间跟踪方法的分类

对一个极端 (最大或最小) 特征对 (特征值与特征向量) 进行迭代计算最早可以追溯到 1966 年 [56]。时隔十几年后，Thompson 于 1980 年提出了估计与样本协方差矩阵最小特征值相对应的特征向量的最小均方 (LMS) 型自适应方法，并结合 Pisarenko 谱估计子提供了角度/频率的自适应跟踪算法 [442]。Sarkar 等人 [402] 应用共轭梯度法，对与慢时变信号协方差矩阵的最小特征值相对应的极端特征向量的变化进行跟踪，并证明他们的方法比 Thompson 的 LMS 方法收敛快得多。这些方法只跟踪单个极端特征值和特征向量，虽然应用有限，但是后来被推广成了特征子空间的跟踪和更新方法。1990 年，Comon 与 Golub[101] 提出了跟踪奇异值和奇异向量的极端对的 Lanczos 方法。Lanczos 方法原是解决某些大的、稀疏的对称特征问题 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \lambda\boldsymbol{x}$ 的一种常用方法 [184]。

最早的特征值和特征向量更新方法是由 Golub 于 1973 年提出的 [180]。后来，Golub 的更新思想被 Bunch 和他的同事加以扩展 [65],[66]。推广方法的基本思想就是在每次秩 1 修正后更新协方差矩阵的特征值分解；然后利用交织定理 (interlacing theorem) 将矩阵的特征根定位，用迭代求根方法更新特征根的位置，继而更新特征向量。在文献 [408] 中，Schreiber 引入一种变换，将大部分的复数算术运算变成实数运算，并使用 Karasalo 的子空间平均方法 [245] 进一步减少运算量。DeGroat 与 Roberts 发展了一种基于两两 Gram-Schmidt 正交化的数值稳定的秩 1 特征结构更新方法 [117]。Yu 则在文献 [496] 中将秩 1 特征结构更新推广到了块更新问题。

最早的自适应信号子空间跟踪方法由 Owsley 于 1978 年提出 [347]。Yang 与 Kaveh[490] 利用随机梯度法提出了一种 LMS 型子空间跟踪算法，推广了 Owsley 的方法和 Thompson 的方法。这种 LMS 型算法具有高并行结构和低计算复杂度。Karhunen [246] 则通过发展一种子空间计算的随机逼近法推广了 Owsley 的思想。

如同 Yang 与 Kaveh 推广 Thompson 思想以发展 LMS 型子空间跟踪算法一样，Fu 与 Dowling [160] 推广 Sarkar 等人的想法，发展了一种基于共轭梯度的子空间跟踪算法。

近二十多年，特征子空间的跟踪与更新成了一个非常活跃的研究领域。由于子空间跟踪主要用于实时信号处理，所以要求它们应该是快速算法。快速算法至少应该考虑到以下因素：

(1) n 时刻的子空间可以通过更新 $n-1$ 时刻的子空间获得。

(2) $n-1$ 时刻到 n 时刻的协方差矩阵的变化应该尽可能是低秩变化 (最好是秩 1 变化或秩 2 变化)。

(3) 只需要跟踪低维子空间。

特征子空间跟踪与更新方法可以分为以下四大类。

在一些特征子空间方法 (如 MUSIC) 的应用中，只需要使用噪声子空间特征向量的正交基，而无需使用特征向量本身。这一特点可以简化一类特征子空间的自适应跟踪问题。我们把这种只跟踪噪声子空间的正交基的方法归为第一类，它们分别基于矩阵的秩显露 URV 分解 [432] 和秩显露 QR 分解 [45]。

在同时解决特征值和特征子空间二者的跟踪或更新问题的方法中，第二类方法的共同视线是把非平稳信号在 k 时刻的协方差矩阵看作是 $k-1$ 时刻的协方差矩阵与另外一个秩等于 1 的矩阵 (它是观测向量的共轭转置与其本身的乘积) 之和。因此，协方差矩阵的特征值分解的跟踪与所谓的秩 1 更新密切相关。文献 [496] 和文献 [74] 是这类方法的两个典型代表，其中，文献 [74] 的方法将秩 1 更新与一阶扰动问题联系起来，文献 [496] 的方法则包含了基于秩 1 和秩 2 修正的修正特征值分解的递推更新。

第三类方法则将特征子空间的确定当作一个最优化问题来求解：一种是约束最优化问题，另一种是无约束最优化问题。约束最优化问题可以利用随机梯度法 [490] 和共轭梯度法 [160] 来求解。无约束最优化对特征子空间提出了一种新的解释，相应的方法称为投影逼近子空间跟踪 [485]。这类方法的另一典型代表以 Lanczos 算法为基础。利用 Lanczos 型迭代和随机逼近的概念，可以进行时变数据矩阵的子空间计算 [161]。Xu 等人在文献 [482] 和 [483] 中分别提出了三 Lanczos 和双 Lanczos 子空间跟踪算法；前者适用于协方差矩阵的特征值分解，后者针对数据矩阵的奇异值分解；而且，在 Lanczos 递推过程中还能够对主特征值和主奇异值的个数进行检验估计。由于 Lanczos 算法与共轭梯度法有密切的数学联系 [184]，所以这种方法虽然与最优化问题无直接联系，但仍可归属为第三类方法。

第四类方法将经典的特征值分解/奇异值分解的批处理方法 (如 QR 分解算法、Jacobi 方法、乘幂迭代等) 加以修正和推广，使之成为自适应的方法。例如，基于 QR 更新和 Jacobi 型方法的奇异值分解更新算法 [320]。

从下节起，将依次介绍几种具有代表性的子空间跟踪方法。

9.5 基于扰动理论的子空间跟踪

基于特征问题的秩 1 更新方法由 Golub [181] 于 1973 年提出。随后，Bunch 等人 [65] 于 1978 年对这一方法加以改进。

另外一方面，在秩 1 更新方法提出的前几年，Rellich 在他的著作中就已系统地介绍了特征问题的扰动理论 [385]。物理学家 Sakurai 则在 1980 年代中期，将扰动理论应用于量子力学确定扰动对能量特征值的影响。1994 年，Champagne [74] 应用无退化扰动理论，建立了秩 1 更新与扰动之间的关系，并提出了基于一阶扰动的特征值和特征子空间的跟踪方法。2000 年，Oates [339] 将退化扰动理论应用于子空间跟踪，推广了 Champagne 的研究成果。

9.5.1 秩 1 更新与扰动理论

考虑下列具有代表性的数学模型：

$$\boldsymbol{x}(k)=\boldsymbol{A}(k)\boldsymbol{s}(k)+\boldsymbol{n}(k) \tag{9.5.1}$$

其中，$\boldsymbol{A}(k)$ 为 $L\times M$ 矩阵；$\boldsymbol{s}(k)$ 是 $M\times 1$ 信号向量；$\boldsymbol{x}(k)$ 为 $L\times 1$ 观测数据向量，而 $\boldsymbol{n}(k)$ 为 $L\times 1$ 加性白噪声向量，各个白噪声分量具有相同的随时间变化的方差 $\sigma^2(k)$。假定 $\boldsymbol{s}(k)$ 和 $\boldsymbol{x}(k)$ 是非平稳的随机过程，分别具有随时间变化的 $M\times M$ 协方差矩阵 $\boldsymbol{C}_s(k)=\mathrm{E}\{\boldsymbol{s}(k)\boldsymbol{s}^{\mathrm{H}}(k)\}$ 和 $L\times L$ 协方差矩阵 $\boldsymbol{C}(k)=\mathrm{E}\{\boldsymbol{x}(k)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(k)\}$。直接计算知，协方差矩阵为

$$\boldsymbol{C}(k)=\boldsymbol{A}(k)\boldsymbol{C}_s(k)\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}(k)+\sigma_n^2\boldsymbol{I}_L \tag{9.5.2}$$

假定只有 K 个观测数据向量 $\boldsymbol{x}(k)\,(k=1,2,\cdots,K)$ 可以利用，并且样本协方差矩阵由

$$\hat{\boldsymbol{C}}(k)=\frac{1}{K}\sum_{k=1}^{K}\boldsymbol{x}(k)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(k) \tag{9.5.3}$$

估计。在实际中，常利用下面的递推公式更新样本协方差矩阵：

$$\hat{\boldsymbol{C}}(k)=\alpha\hat{\boldsymbol{C}}(k-1)+(1-\alpha)\boldsymbol{x}(k)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(k) \tag{9.5.4}$$

式中，α 是一个实的平滑因子，满足 $0\leqslant\alpha\leqslant 1$。上式称为样本协方差矩阵的秩 1 更新，它等价于 $\boldsymbol{x}(k)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(k)$ 的指数时间平均。因子 $1/(1-\alpha)$ 提供了指数窗有效长度的一个粗略测度。

有趣的是，很容易将秩 1 更新与扰动问题联系起来。为了看出这一点，将式 (9.5.4) 改写作

$$\hat{\boldsymbol{C}}(k)=\hat{\boldsymbol{C}}(k-1)+\varepsilon[\boldsymbol{x}(k)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(k)-\hat{\boldsymbol{C}}(k-1)] \tag{9.5.5}$$

式中，$\varepsilon=1-\alpha, 0\leqslant\varepsilon\leqslant 1$。对于足够小的 ε，式 (9.5.5) 中的修正项 $\varepsilon[\boldsymbol{x}(k)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(k)-\hat{\boldsymbol{C}}(k-1)]$ 可以解释为 $\hat{\boldsymbol{C}}(k-1)$ 的一扰动项。下面再进一步将 $\hat{\boldsymbol{C}}(k)$ 的特征值分解与 $\hat{\boldsymbol{C}}(k-1)$ 的特征值分解通过这一扰动项联系起来。

首先注意到，式 (9.5.5) 中的 $\hat{\boldsymbol{C}}(k)$ 是 ε 的幂级数表示，并且当 $\varepsilon\to 0$ 时 $\hat{\boldsymbol{C}}(k)$ 收敛为 $\hat{\boldsymbol{C}}(k-1)$。假定 $\hat{\boldsymbol{C}}(0)$ 是 Hermitian 矩阵，由式 (9.5.5) 知，对所有正整数 k 和所有实的 ε 而言，$\hat{\boldsymbol{C}}(k)$ 均为 Hermitan 矩阵。

根据 Hermitian 矩阵扰动理论的基本定理 [385] 知，$\hat{\boldsymbol{C}}(k)$ 的特征值与归一化的特征向量也可以用 ε 的幂级数展开，并且当 $\varepsilon\to 0$ 时，它们将分别收敛为 $\hat{\boldsymbol{C}}(k-1)$ 的特征值和特征向量。下面用数学公式更确切地叙述这一基本定理的涵义。令 $\lambda_i(k)$ 和 $\boldsymbol{u}_i(k)$ 分别表示式 (9.5.5) 中的样本协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{C}}(k)$ 的特征值和特征向量，即

$$\hat{\boldsymbol{C}}(k)\boldsymbol{u}_i(k)=\lambda_i(k)\boldsymbol{u}_i(k) \tag{9.5.6}$$

$$\boldsymbol{u}_i(k)\boldsymbol{u}_j(k)=\delta_{ij} \tag{9.5.7}$$

式中，δ_{ij} 为 Kronecker δ 函数。根据文献 [385] 第 1 章的定理 1，存在幂级数

$$\lambda_i(k) = \lambda_{i0} + \lambda_{i1}\varepsilon + \lambda_{i2}\varepsilon^2 + \cdots, \qquad \lambda_{i0} = \lambda_i(k-1) \tag{9.5.8}$$

$$\boldsymbol{u}_i(k) = \boldsymbol{u}_{i0} + \boldsymbol{u}_{i1}\varepsilon + \boldsymbol{u}_{i2}\varepsilon^2 + \cdots, \qquad \boldsymbol{u}_{i0} = \boldsymbol{u}_i(k-1) \tag{9.5.9}$$

它们均在 $\varepsilon = 0$ 的邻域内收敛。上述两式分别满足式 (9.5.6) 和式 (9.5.7)。在式 (9.5.8) 和式 (9.5.9) 中，$\lambda_{i0} = \lambda_i(k-1)$ 和 $\boldsymbol{u}_{i0} = \boldsymbol{u}_i(k-1)$ 分别是 $\hat{\boldsymbol{C}}(k-1)$ 的特征值和归一化特征向量，而 λ_{ij} 和 $\boldsymbol{u}_{ij} (j \geqslant 1)$ 是待定的未知系数。

无论是否有多重特征值，式 (9.5.8) 和式 (9.5.9) 都是成立的。下面分两种情况讨论如何利用扰动理论进行子空间的跟踪：

(1) 协方差矩阵 $\boldsymbol{C}(k)$ 不存在任何多重的特征值，称为无退化特征值情况。此时，基于扰动理论的子空间跟踪称为无退化扰动子空间跟踪 (nondegenerate perturbation subspace tracking)。

(2) 协方差矩阵存在多重的特征值，称为退化特征值情况。在这种情况下，基于扰动理论的子空间跟踪称为退化扰动子空间跟踪 (degenerate perturbation subspace tracking)。

在实际中，式 (9.5.8) 和式 (9.5.9) 一类的扰动级数需要截尾，以便得到容易使用的逼近公式。特别地，对于一正整数 n，可以通过省略掉所有 $m\,(> n)$ 阶的扰动项 ε^m 得到 n 阶逼近。使用 n 阶逼近的扰动级数的理论称为 n 阶扰动理论。这类逼近的理论基础是扰动级数在 $\varepsilon = 0$ 的某个邻域收敛。因此，如果 ε 足够小，则低阶逼近可以用来计算 $\lambda_i(k)$ 和 $\boldsymbol{u}_i(k)$，并且有很好的精度。

在子空间跟踪中，最常用的扰动理论有两种：

(1) 一阶扰动理论 (first-oredr perturbation theory)：使用

$$\lambda_i(k) = \lambda_{i0} + \lambda_{i1}\varepsilon, \qquad \lambda_{i0} = \lambda_i(k-1) \tag{9.5.10}$$

$$\boldsymbol{u}_i(k) = \boldsymbol{u}_{i0} + \boldsymbol{u}_{i1}\varepsilon, \qquad \boldsymbol{u}_{i0} = \boldsymbol{u}_i(k-1) \tag{9.5.11}$$

更新特征对。

(2) 二阶扰动理论 (second-order perturbation theory)：使用

$$\lambda_i(k) = \lambda_{i0} + \lambda_{i1}\varepsilon + \lambda_{i2}\varepsilon^2, \qquad \lambda_{i0} = \lambda_i(k-1) \tag{9.5.12}$$

$$\boldsymbol{u}_i(k) = \boldsymbol{u}_{i0} + \boldsymbol{u}_{i1}\varepsilon + \boldsymbol{u}_{i2}\varepsilon^2, \qquad \boldsymbol{u}_{i0} = \boldsymbol{u}_i(k-1) \tag{9.5.13}$$

更新特征对。

一般说来，在无退化扰动子空间跟踪中，只使用一阶扰动理论，即可获得子空间的满意跟踪；而在退化扰动子空间跟踪中，仅采用一阶扰动理论是不够的，需要使用二阶扰动理论，以便改善子空间的跟踪结果。

9.5.2 无退化扰动子空间跟踪

下面讨论如何运用一阶扰动递推更新公式 (9.5.10) 和 (9.5.11)，获得样本协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{C}}(k)$ 的特征值分解。首先推导式 (9.5.10) 和式 (9.5.11) 中的一阶扰动系数 λ_{i1} 和一阶扰动向量 $\boldsymbol{u}_{i1}$ 的基本方程组。为简化符号，令

$$\boldsymbol{C}_0 = \hat{\boldsymbol{C}}(k-1) \tag{9.5.14}$$

$$\boldsymbol{C}_1 = \boldsymbol{x}(k)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(k) - \hat{\boldsymbol{C}}(k-1) \tag{9.5.15}$$

于是，式 (9.5.5) 可以表示为

$$\hat{\boldsymbol{C}}(k) = \boldsymbol{C}_0 + \varepsilon \boldsymbol{C}_1 \tag{9.5.16}$$

在下面的推导中，暂时假定零阶系数 $\lambda_{i0} = \lambda_i(k-1)$ 和 $\boldsymbol{u}_{i0} = \boldsymbol{u}_i(k-1)$ 分别是 $\boldsymbol{C}_0 = \hat{\boldsymbol{C}}(k-1)$ 的精确特征值和特征向量。

将式 (9.5.8)，式 (9.5.9) 和式 (9.5.16) 一起代入式 (9.5.6)，则有

$$\boldsymbol{C}_0\boldsymbol{u}_{i0} + (\boldsymbol{C}_0\boldsymbol{u}_{i1} + \boldsymbol{C}_1\boldsymbol{u}_{i0})\varepsilon = \lambda_{i0}\boldsymbol{u}_{i0} + (\lambda_{i0}\boldsymbol{u}_{i1} + \lambda_{i1}\boldsymbol{u}_{i0})\varepsilon + O(\varepsilon^2) \tag{9.5.17}$$

其中，$O(\varepsilon^2)$ 表示数量级 ε^2 的项。由于式 (9.5.17) 对 $\varepsilon = 0$ 的邻域内的所有 ε 成立，故 ε 的对应幂项必然相等，这就给出结果

$$\boldsymbol{C}_0\boldsymbol{u}_{i0} = \lambda_{i0}\boldsymbol{u}_{i0} \tag{9.5.18}$$

$$\boldsymbol{C}_0\boldsymbol{u}_{i1} + \boldsymbol{C}_1\boldsymbol{u}_{i0} = \lambda_{i0}\boldsymbol{u}_{i1} + \lambda_{i1}\boldsymbol{u}_{i0} \tag{9.5.19}$$

式 (9.5.19) 可以用一种更加方便的形式表示，方法是将它投影到正交基向量 $\boldsymbol{u}_{j0}(j = 1,2,\cdots,L)$ 上。用 $\boldsymbol{u}_{i0}^{\mathrm{H}}$ 左乘式 (9.5.19)，并观察由式 (9.5.18) 有 $\boldsymbol{u}_{i0}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_0 = \lambda_{i0}\boldsymbol{u}_{i0}^{\mathrm{H}}$，然后再利用集合 $\{\boldsymbol{u}_{i0}, i = 1,2,\cdots,L\}$ 的正交性，即可得到

$$\lambda_{i1} = \boldsymbol{u}_{i0}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{u}_{i0} \tag{9.5.20}$$

这就是直接确定 λ_{i1} 的公式。

类似地，用 $\boldsymbol{u}_{j0}^{\mathrm{H}}(j \neq i)$ 左乘式 (9.5.19) 得到

$$(\lambda_{j0} - \lambda_{i0})\boldsymbol{u}_{j0}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_{i1} = -\boldsymbol{u}_{j0}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}_1\boldsymbol{u}_{i0}, \qquad j \neq i \tag{9.5.21}$$

将式 (9.5.9) 代入式 (9.5.7)，并令 ε 的对应幂相等，则得到另一结果：

$$\boldsymbol{u}_{i1}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_{j0} + \boldsymbol{u}_{i0}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_{j1} = 0 \tag{9.5.22}$$

由式 (9.5.21) 和式 (9.5.22) 可得到

$$b_{ji} = \boldsymbol{u}_{j0}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_{i1} \tag{9.5.23}$$

式中，b_{ji} 是 $\boldsymbol{u}_{i1}$ 用基向量 $\{\boldsymbol{u}_{i0}, i=1,2,\cdots,L\}$ 展开时的展开系数。因此，一旦系数 b_{ji} 求出，则 $\boldsymbol{u}_{i1}$ 即可利用重构公式

$$\boldsymbol{u}_{i1}=\sum_{j=1}^{L} b_{ji}\boldsymbol{u}_{j0} \tag{9.5.24}$$

获得。

令无扰动的特征值 λ_{i0} 按递减顺序排列：

$$\lambda_{10}>\lambda_{20}>\cdots>\lambda_{L0} \tag{9.5.25}$$

将式 (9.5.14) 和式 (9.5.15) 代入式 (9.5.20)，并使用式 (9.5.18) 及无扰动特征向量的正交性，则有

$$\lambda_{i1}=|y_i|^2-\lambda_{i0} \tag{9.5.26}$$

式中

$$y_i=\boldsymbol{u}_{i0}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}(k) \tag{9.5.27}$$

是数据向量 $\boldsymbol{x}(k)$ 在无扰动特征向量 $\boldsymbol{u}_{i0}$ 上的正交投影系数。

与式 (9.5.22) 的处理相类似，并注意到在式 (9.5.25) 的假定下 $\lambda_{j0}-\lambda_{i0}\neq 0 (j\neq i)$，则由式 (9.5.21) 得

$$b_{ji}=-b_{ij}^{*}=\frac{y_i^{*}y_i}{(\lambda_{i0}-\lambda_{j0})}, \qquad j\neq i \tag{9.5.28}$$

这一结果与式 (9.5.22) 一致。剩余的系数 b_{ii} 可以这样来求：当 $j=i$ 时，式 (9.5.22) 简化为 $\mathrm{Re}(b_{ii})=0$，这里，$\mathrm{Re}(\cdot)$ 和 $\mathrm{Im}(\cdot)$ 分别表示一系数的实部和虚部。由于没有任何其他的假定，故 $\mathrm{Im}(b_{ii})$ 可以任意选择。最简单的选择是 $\mathrm{Im}(b_{ii})=0$，从而有

$$b_{ii}=0 \tag{9.5.29}$$

根据式 (9.5.23) 知，式 (9.5.29) 意味着 $\boldsymbol{u}_{i1}$ 与相应的特征向量 $\boldsymbol{u}_{i0}$ 正交。

借助观测数据向量 $x(k)$ 以及无扰动的特征值分解 $\lambda_{i0}=\lambda_i(k-1)$ 和 $\boldsymbol{u}_{i0}=\boldsymbol{u}_i(k-1), i=1,2,\cdots,L$，式 (9.5.26)~ 式 (9.5.29) 连同式 (9.5.24) 一起清晰地定义了一阶扰动系数 λ_{i1} 和一阶扰动向量 $\boldsymbol{u}_{i1}$。

算法 9.5.1 (无退化特征值情况下的自适应特征值分解算法)[74]

$\boldsymbol{x}(k)\leftarrow\sqrt{\epsilon}\boldsymbol{x}(k)$

for $i=1$ to L:

  $\eta=\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}(k-1)\boldsymbol{x}(k)$

  $y_i=|\eta|$ (y_i 现在是实的)

  $\boldsymbol{u}_i(k-1)\leftarrow(\eta/y_i)\boldsymbol{u}_i(k-1)$

end for

for $i=1$ to L:

```
        b_ii = 0
        for j = i + 1 to L :
            b_ji = y_i y_j / max{δλ_i(k-1), λ_i(k-1) - λ_j(k-1)}
            b_ij = -b_ji
        end for
    end for
    for i = 1 to L:
        λ_i(k) = (1 - ε)λ_i(k-1) + y_i^2
        u_i(k) = u_i(k-1) + Σ_{j=1}^{L} b_ji u_j(k-1)
        u_i(k) ← u_i(k)/||u_i(k)||
    end for
```

下面介绍无退化扰动子空间跟踪的另一种表示方法。定义

$$\nabla(k) = \boldsymbol{C}(k) - \boldsymbol{C}(k-1)$$

是协方差矩阵相邻时刻的变化。当 $\boldsymbol{C}(k)$ 为样本协方差矩阵时，称 $\nabla(n)$ 为协方差矩阵估计的误差矩阵。显然，样本协方差矩阵的特征值和特征向量都会因为误差矩阵的存在而产生扰动。定义特征向量的扰动矩阵 $\boldsymbol{\Delta}$ 的元素为

$$\Delta_{ij}(k) = \boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}(k-1)\nabla(k)\boldsymbol{u}_j(k-1), \quad i,j = 1,2,\cdots,L \tag{9.5.30}$$

于是，一阶非退化扰动理论使用递推公式 [398],[339]

$$\lambda_i(k) = \lambda_i(k-1) + \Delta_{ii}(k), \quad i = 1,2,\cdots,L \tag{9.5.31}$$

$$\boldsymbol{u}_i(k) = \boldsymbol{u}_i(k-1) + \sum_{l\neq i}\rho_{li}(k)\boldsymbol{u}_l(k-1) \quad i = 1,2,\cdots,L \tag{9.5.32}$$

更新特征值和特征向量，式中

$$\rho_{li}(k) = \begin{cases} 1, & l = i \\ \dfrac{\Delta_{li}(k)}{\lambda_i(k-1) - \lambda_l(k-1)}, & l \neq i \end{cases} \tag{9.5.33}$$

对于二阶非退化扰动理论，特征值和特征向量的更新公式为 [398],[339]

$$\lambda_i(k) = \lambda_i(k-1) + \Delta_{ii}(k) + \sum_{l\neq i}\frac{|\Delta_{li}(k)|^2}{\lambda_i(k-1) - \lambda_l(k-1)} \tag{9.5.34}$$

$$\boldsymbol{U}(k) = \boldsymbol{U}(k-1)\boldsymbol{E}(k) \tag{9.5.35}$$

式中，$\boldsymbol{U}(k) = [\boldsymbol{u}_1(k), \boldsymbol{u}_2(k), \cdots, \boldsymbol{u}_L(k)]$ 是待跟踪的特征向量组成的矩阵，而矩阵 $\boldsymbol{E}(k)$ 的元素为

$$E_{li} = \begin{cases} 1, & l = i \\ \rho_{li}(k) + \dfrac{1}{\lambda_i(k-1) - \lambda_l(k-1)}\left[\displaystyle\sum_{m\neq i}\Delta_{li}(k)\rho_{mi}(k) - \Delta_{ii}(k)\rho_{li}(k)\right], & l \neq i \end{cases} \tag{9.5.36}$$

式中，$\rho_{l_i}(k)$ 由式 (9.5.33) 定义，并且 $l, i = 1, 2, \cdots, L$。

无论是一阶扰动理论下的更新公式 (9.5.33)，还是二阶扰动理论下的更新公式 (9.5.34) 和 (9.5.36)，都包含两个特征值之差 $\lambda_i(k-1) - \lambda_l(k-1)$ 的除法。显然，如果有任意两个特征值相同或者接近，则这些更新公式将是数值不稳定的。在这类情况下，需要考虑使用针对退化特征值情况专门设计的退化扰动子空间跟踪方法。

9.5.3 退化扰动子空间跟踪

退化特征值有两种常见的情况。一种是某些特征值近似相等，称为近似退化 (near degeneracy)；另外一种是某些特征值完全相等，称为完全退化 (exact degeneracy)。尽管在某些情况下，观测数据向量的理想协方差矩阵可能存在某些完全相等的信号特征值，但由于估计误差的影响，表现在样本协方差矩阵，则为近似相等的特征值，即属于近似退化情况。另外一方面，在假定各个加性噪声分量统计不相关、并且具有相同方差的情况下，通常需要采用 Karasalo 的子空间平均 [245]，将样本协方差矩阵的小特征值的平均值作为噪声特征值 (噪声功率) 的估计值。因此，这是一种完全退化的情况。从这些讨论中，可以得出结论：在信号子空间的跟踪中，需要考虑完全退化或者近似退化的特征值，而在噪声子空间的跟踪里，则只考虑完全退化的特征值。

以噪声子空间的退化为例。假定需要对角化矩阵

$$\boldsymbol{\Sigma}(k-1) + \boldsymbol{\Delta}(k) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \sigma^2 \boldsymbol{I} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Delta}_{11} & \boldsymbol{\Delta}_{12} \\ \boldsymbol{\Delta}_{21} & \boldsymbol{\Delta}_{22} \end{bmatrix} \tag{9.5.37}$$

式中，$\boldsymbol{\Sigma}_1$ 为对角矩阵，其对角元素为样本协方差矩阵在 $k-1$ 时刻的特征值；$\sigma^2 = \sigma^2(k-1)$ 是 $k-1$ 时刻的噪声特征值估计；$\boldsymbol{\Delta}_{ij}$ 表示由 $k-1$ 时刻的特征向量 $\boldsymbol{u}_1(k-1), \boldsymbol{u}_2(k-1), \cdots, \boldsymbol{u}_L(k-1)$ (即基向量) 引起的对 k 时刻特征值的分块扰动矩阵。

上述完全退化的特征值可以变成一个无退化的问题：

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Sigma}(k-1) + \boldsymbol{\Delta}(k) &= \bar{\boldsymbol{\Sigma}}(k-1) + \bar{\boldsymbol{\Delta}}(k) \\ &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \sigma^2 \boldsymbol{I} + \boldsymbol{\Delta}_{22} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Delta}_{11} & \boldsymbol{\Delta}_{12} \\ \boldsymbol{\Delta}_{21} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{9.5.38}$$

显然，矩阵 $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}(k-1)$ 的噪声子空间部分不再存在退化特征值，因为扰动矩阵中的分块矩阵 $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}_{22}$ 等于零矩阵。

现在，原退化噪声子空间变成了无退化噪声子空间，噪声特征值的跟踪问题也变成了矩阵 $\bar{\boldsymbol{\Sigma}}(k-1)$ 的对角化问题。选择酉变换

$$\boldsymbol{E}(k) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{E}_2(k) \end{bmatrix} \tag{9.5.39}$$

使得

$$\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(k-1)=\boldsymbol{E}^{\mathrm{H}}(k)\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}(k-1)\boldsymbol{E}(k)$$
$$=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{E}^{\mathrm{H}}(k)[\sigma^2\boldsymbol{I}+\boldsymbol{\Delta}_{22}]\boldsymbol{E}(k)\end{bmatrix}$$
$$=\begin{bmatrix}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_1 & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_2\end{bmatrix} \tag{9.5.40}$$

为对角矩阵。

下面是针对近似退化情况的噪声子空间跟踪算法。

算法 9.5.2 (噪声子空间的特征值分解算法)[74]

$\boldsymbol{x}(k)\leftarrow\sqrt{\epsilon}\boldsymbol{x}(k)$

for $i=1$ to M:

  $\eta=\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}(k-1)\boldsymbol{x}(k)$

  $y_i=|\eta|$ (y_i 现在是实的)

  $\boldsymbol{u}_i(k-1)\leftarrow(\eta/y_i)\boldsymbol{u}_i(k-1)$

end for

$\boldsymbol{x}_n=\boldsymbol{x}(k)-\sum\limits_{i=1}^{M}y_i\boldsymbol{u}_i(k-1)$

$y_{M+1}=\|\boldsymbol{x}_n\|$

$\boldsymbol{u}_{M+1}(k-1)=\boldsymbol{x}_n/y_{M+1}$

for $i=1$ to $M+1$:

  $b_{ii}=0$

  for $j=i+1$ to $M+1$:

    $b_{ji}=y_iy_j/\max(\delta\lambda_i(k-1),\lambda_i(k-1)-\lambda_j(k-1))$

    $b_{ij}=-b_{ji}$

  end for

end for

for $i=1$ to M:

  $\lambda_i(k)=(1-\epsilon)\lambda_i(k-1)+y_i^2$

  $\boldsymbol{u}_i(k)=\boldsymbol{u}_i(k-1)+\sum\limits_{j=1}^{M+1}b_{ji}\boldsymbol{u}_j(k-1)$

  $\boldsymbol{u}_i(k)\leftarrow\boldsymbol{u}_i(k)/\|\boldsymbol{u}_i(k)\|$

end for

$\lambda_{M+1}(k)=\rho(k)=(1-\epsilon)\rho(k-1)+y_{M+1}^2/(L-M)$

最近，Oates 提出了基于退化扰动理论的信号子空间跟踪算法 [339]，它适用于存在完全退化和近似退化的信号特征对的跟踪。

9.6 修正特征值分解及其递推更新

更新协方差矩阵的最常用方法是式 (9.5.4) 所示的秩 1 更新，我们把它重写如下：

$$\hat{\boldsymbol{R}}_x(k)=\mu\hat{\boldsymbol{R}}_x(k-1)+(1-\mu)\boldsymbol{x}(k)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(k) \tag{9.6.1}$$

然而，这种指数加窗的方法有几个缺点：旧的数据的影响会持续很长时间，指数遗忘因子 μ 必须预先选择。

现在考虑使用滑动窗的更新方法。这类似于短时 Fourier 变换的做法，该变换把窗口内的非平稳信号视为平稳信号。具体说来，对数据矩阵加上一行和从数据矩阵减去一行对应于下面的协方差矩阵的秩 2 更新问题：

$$\hat{\boldsymbol{R}}_x(k)=\hat{\boldsymbol{R}}_x(k-1)+\boldsymbol{\alpha}(k)\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{H}}(k)-\boldsymbol{\beta}(k)\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{H}}(k) \tag{9.6.2}$$

其中，$\boldsymbol{\alpha}(k)$ 是要加上的数据向量，而 $\boldsymbol{\beta}(k)$ 是要删去的数据向量。这种由两个秩 1 更新组成的更新称为秩 2 更新，是由 DeGroat 与 Roberts [118] 给出的。

9.6.1 修正特征值问题

所谓修正特征值问题就是在已知原 Hermitian 矩阵的特征对 (特征值与特征向量) 的情况下计算修正之后的 Hermitian 矩阵的特征对。更一般地，我们来考虑下列加性修正：

$$\hat{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{R}\pm\boldsymbol{E} \tag{9.6.3}$$

其中，$\boldsymbol{R}$ 和 $\hat{\boldsymbol{R}}\in C^{N\times N}$ 分别是原来的和修正后的协方差矩阵，且 $\boldsymbol{E}$ 为修正矩阵 (在最简单的情况下它包括了增加和删去的数据向量对应的两个秩 1 矩阵)。称由 $\boldsymbol{R}$ 的特征对求 $\hat{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{R}+\boldsymbol{E}$ 的特征对的计算问题为更新 (updating)，并称求 $\hat{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{R}-\boldsymbol{E}$ 的特征对的计算问题为复旧 (downdating)。注意，矩阵 $\boldsymbol{R},\hat{\boldsymbol{R}}$ 和 $\boldsymbol{E}$ 均是 Hermitian 矩阵；而且修正矩阵 $\boldsymbol{E}$ 一般是不定的，即它可能具有负的特征值 (正的特征值对应更新，负的特征值对应复旧)。假定 $\boldsymbol{E}$ 是秩 k 的，其中，k 一般远小于 N。由于 $\boldsymbol{E}$ 是 Hermitian 的，所以它具有下列加权外积展开：

$$\boldsymbol{E}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{9.6.4}$$

式中，$\boldsymbol{U}\in C^{N\times k}$ 和 $\boldsymbol{S}\in R^{k\times k}$ 为非奇异矩阵。例如，式 (9.6.4) 可以求作 $\boldsymbol{E}$ 的特征值和特征向量展开，其中，$\boldsymbol{S}$ 是对角矩阵，其对角线元素为特征值；$\boldsymbol{U}$ 则是对应的正交特征向量矩阵。另一个例子是 $\boldsymbol{E}$ 的分解直接用数据来表示。此时，$\boldsymbol{S}$ 的对角线元素等于 1 或 -1 (对应于更新或复旧)，$\boldsymbol{U}$ 是具有相应数据向量的矩阵，并且 $\boldsymbol{U}$ 不是正交的。还假定 $\boldsymbol{R}$ 的特征值分解如下：

$$\boldsymbol{R}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{D}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}} \tag{9.6.5}$$

其中，$\boldsymbol{D} \in R^{N\times N}, \boldsymbol{Q} \in C^{N\times N}, \boldsymbol{D} = \mathrm{diag}(d_1, d_2, \cdots, d_N)$ 是特征值矩阵，$\boldsymbol{Q} = [\boldsymbol{q}_1, \boldsymbol{q}_2, \cdots, \boldsymbol{q}_N]$ 是对应的特征向量矩阵。注意 $\boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{I}$。现在的问题是求修正的特征值与特征向量。如果令 $(\lambda, \boldsymbol{x})$ 是 $\hat{\boldsymbol{R}}$ 的特征对, 则有

$$(\hat{\boldsymbol{R}} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \tag{9.6.6}$$

特征值 λ 即可通过求解

$$\det(\hat{\boldsymbol{R}} - \lambda \boldsymbol{I}) = 0 \tag{9.6.7}$$

得出。将式 (9.6.3) 中的 $\hat{\boldsymbol{R}}$ 和式 (9.6.4) 中的 $\boldsymbol{E}$ 代入式 (9.6.6) 得到

$$(\boldsymbol{R} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{0} \tag{9.6.8}$$

将秩 k 修正同问题的其他部分分割开, 即可由上式得到下列方程组:

$$(\boldsymbol{R} - \lambda \boldsymbol{I})\boldsymbol{x} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0} \tag{9.6.9}$$

$$\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{S}^{-1}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0} \tag{9.6.10}$$

从式 (9.6.9) 解出 $\boldsymbol{x}$，并将它代入式 (9.6.10) 得到

$$\boldsymbol{W}(\lambda)\boldsymbol{y} = \boldsymbol{0} \tag{9.6.11}$$

其中

$$\boldsymbol{W}(\lambda) = \boldsymbol{S}^{-1} + \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{R} - \lambda \boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{U} \tag{9.6.12}$$

注意，$\boldsymbol{W}(\lambda)$ 可以辨识为下述矩阵 $\boldsymbol{M}(\lambda)$ 中 $\boldsymbol{R} - \lambda \boldsymbol{I}$ 的 Schur 补 [184]:

$$\boldsymbol{M}(\lambda) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{R} - \lambda \boldsymbol{I} & -\boldsymbol{U} \\ \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{S}^{-1} \end{bmatrix} \tag{9.6.13}$$

$\boldsymbol{W}(\lambda)$ 称为 Weinstein-Aronszajn 矩阵。修正特征值现在可以通过求解 $\det[\boldsymbol{W}(\lambda)] = 0$ 得到。事实上，λ 是 $\hat{\boldsymbol{R}}$ 的特征值即 $\lambda \in \lambda(\hat{\boldsymbol{R}})$，当且仅当 λ 是 $\det[\boldsymbol{W}(\lambda)] = 0$ 的解。由此得到

$$\det(\hat{\boldsymbol{R}} - \lambda \boldsymbol{I}) = \frac{\det[\boldsymbol{M}(\lambda)]}{\det(\boldsymbol{S}^{-1})} \tag{9.6.14}$$

由于 $\boldsymbol{S}$ 可逆，所以 $\det(\hat{\boldsymbol{R}} - \lambda \boldsymbol{I}) = 0$ 将意味着 $\det[\boldsymbol{M}(\lambda)] = 0$。另一方面，$\det[\boldsymbol{M}(\lambda)]$ 可以表示为 $\det[\boldsymbol{M}(\lambda)] = (-1)^k \det(\boldsymbol{R} - \lambda \boldsymbol{I}) \det[\boldsymbol{W}(\lambda)]$，从而有

$$\det[\boldsymbol{W}(\lambda)] = (-1)^k \frac{\det[\boldsymbol{M}(\lambda)]}{\det(\boldsymbol{R} - \lambda \boldsymbol{I})} = (-1)^k \frac{\prod_{i=1}^{N}(\hat{\lambda}_i - \lambda)}{\prod_{i=1}^{N}(\lambda_i - \lambda)} \tag{9.6.15}$$

其中，$\hat{\lambda}_i \in \lambda(\hat{\boldsymbol{R}})$，$\lambda_i \in \lambda(\boldsymbol{R})$。因此，$\{\hat{\lambda}_i\}$ 和 $\{\lambda_i\}$ 分别是有理多项式 $\det[\boldsymbol{W}(\lambda)]$ 的零点和极点。注意，上述推导只适用于 $\boldsymbol{R}$ 和 $\hat{\boldsymbol{R}}$ 的特征值各异的情况。事实上，当 λ 与 $\boldsymbol{R}$ 的特

征值之一相同时, 式 (9.6.12) 中的 $\boldsymbol{R}-\lambda\boldsymbol{I}$ 将不是可逆矩阵。下面介绍 Yu 解决这一问题的方法，它可以分为以下三个步骤 [496]：

(1) 利用压缩映射将多重特征值压缩为单重特征值；

(2) 应用谱分割定理将各异的特征值定位到所希望的任一精度；

(3) 计算与特征值对应的特征向量。

1. 压缩映射

假定 $\boldsymbol{R}$ 具有多重的特征值。分两种情况讨论。

情况 1 $\boldsymbol{U}$ 与 $\boldsymbol{q}_i$ 正交

利用正交条件 $\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{q}_i=\boldsymbol{0}$ 以及式 (9.6.3)~ 式 (9.6.5)，立即有 $\hat{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{q}_i=\boldsymbol{R}\boldsymbol{q}_i$。但是，由于 d_i 和 $\boldsymbol{q}_i$ 是 $\boldsymbol{R}$ 的特征对即 $\boldsymbol{R}\boldsymbol{q}_i=d_i\boldsymbol{q}_i$，故有 $\hat{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{q}_i=d_i\boldsymbol{q}_i$，这表明，$d_i$ 和 $\boldsymbol{q}_i$ 仍然是 $\hat{\boldsymbol{R}}$ 的特征对。

情况 2 原矩阵 $\boldsymbol{R}$ 有多重特征值

令 λ 是 R 的特征值 (多重度为 m)，其对应的特征向量集合为 $\boldsymbol{Q}=[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_m]$。对 $\boldsymbol{Q}$ 进行 Householder 变换 (令 Householder 矩阵为 $\boldsymbol{H}_1$)，使最后 $m-1$ 的特征向量与 $\boldsymbol{U}=[\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_k]$ 中的 $\boldsymbol{u}_1$ 正交, 即

$$\boldsymbol{Q}\boldsymbol{H}_1=[\boldsymbol{q}_1^{(1)},\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_m^{(1)}]=\boldsymbol{Q}^{(1)} \tag{9.6.16}$$

或者

$$\boldsymbol{q}_i^{(1)^{\mathrm{H}}}\boldsymbol{u}_1=0,\qquad i=2,3,\cdots,m \tag{9.6.17}$$

这样一来, 根据情况 1 的有关结果易知，$\{\boldsymbol{q}_i\}_{i=2}^m$ 是与 $\lambda_1\in\lambda(\hat{\boldsymbol{R}})$ 对应的特征向量，而 λ_1 的多重度为 $m-1$。其中，Householder 矩阵 $\boldsymbol{H}_1$ 为正交矩阵，由

$$\boldsymbol{H}_1=\boldsymbol{I}-\frac{2(\boldsymbol{b}_1\boldsymbol{b}_1^{\mathrm{H}})}{\boldsymbol{b}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{b}_1} \tag{9.6.18}$$

给定，并且 $\boldsymbol{b}_1=\boldsymbol{z}+\sigma\boldsymbol{e}_1$。这里，$\boldsymbol{z}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_1,\sigma=\|\boldsymbol{z}\|_2$，$\boldsymbol{e}_1=[1,0,\cdots,0]^{\mathrm{H}}$。令 $\hat{\boldsymbol{Q}}_1^{(1)}=[\boldsymbol{q}_2^{(1)},\boldsymbol{q}_2^{(1)},\cdots,\boldsymbol{q}_m^{(1)}]$。类似地，又可进行另外一次 Householder 变换得到

$$\hat{\boldsymbol{Q}}_1^{(1)}\boldsymbol{H}_2=[\boldsymbol{q}_2^{(2)},\boldsymbol{q}_3^{(2)},\cdots,\boldsymbol{q}_m^{(2)}]$$

$$\boldsymbol{q}_i^{(2)}\boldsymbol{u}_2=0,\qquad i=3,4,\cdots,m$$

经过第 k 次类似 Householder 变换后, 就可以得到

$$\hat{\boldsymbol{Q}}_1^{(k-1)}\boldsymbol{H}_k=[\boldsymbol{q}_k^{(k)},\boldsymbol{q}_{k+1}^{(k)},\cdots,\boldsymbol{q}_m^{(k)}] \tag{9.6.19}$$

$$\boldsymbol{q}_i^{(k)}\boldsymbol{u}_k=0,\qquad i=k+1,k+2,\cdots,m \tag{9.6.20}$$

于是，$\{\boldsymbol{q}_i^{(k)}\}_{i=k+1}^m$ 现在是 $\hat{\boldsymbol{R}}$ 的多重度为 $m-k$ 的特征值对应的特征向量。经过以上的压缩映射, 即可把任何一个多重的特征值压缩为单重的特征值。

2. 谱分割

假定经压缩映射后，$\boldsymbol{R}$ 的所有多重特征值 d_i 各不相同，并且 $\boldsymbol{q}_i^{\rm H}\boldsymbol{U}=\boldsymbol{0}^{\rm T}$。现在的问题是让这些各不相同的特征值定位在所希望的精度上。解决这一问题的理论根据就是所谓的谱分割公式 (spectrum-slicing formula) [32]：

$$N_{\hat{\boldsymbol{R}}}(\lambda)=N_{\boldsymbol{R}}(\lambda)+D^+[\boldsymbol{W}(\lambda)]-D^+[\boldsymbol{S}] \tag{9.6.21}$$

式中，$N_{\hat{\boldsymbol{R}}}(\lambda)$ 和 $N_{\boldsymbol{R}}(\lambda)$ 分别为矩阵 $\hat{\boldsymbol{R}}$ 和 $\boldsymbol{R}$ 小于 λ 的特征值个数；$D^+[\boldsymbol{W}(\lambda)]$ 是矩阵 $\boldsymbol{W}(\lambda)$ 的正惯性，即 $\boldsymbol{W}(\lambda)$ 的正特征值的个数；而 $D^+[\boldsymbol{S}]$ 则是 $\boldsymbol{S}$ 的正惯性。其中，$N_{\boldsymbol{R}}(\lambda)$ 的值很容易得到，因为 $\boldsymbol{R}$ 的特征值分解为已知；而 $D^+[\boldsymbol{S}]$ 也很容易从 $\boldsymbol{E}$ 的特征值分解 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{U}^{\rm H}$ 求得，即 $D^+[\boldsymbol{S}]$ 实际上是修正矩阵 $\boldsymbol{E}$ 的正特征值个数。至于 $D^+[\boldsymbol{W}(\lambda)]$ 的计算，则可以利用式 (9.6.12) 直接计算出对应不同 λ 的矩阵 $\boldsymbol{W}(\lambda)$，然后利用 ${\rm LDL^H}$ 分解或对角基更换分解 (例如 LINPACK 中的现有程序) 求出 $\boldsymbol{W}(\lambda)$ 的惯性，从而得到正惯性 $D^+[\boldsymbol{W}(\lambda)]$。特征值搜索算法如下：

(1) 利用式 (9.6.21) 将特征值定位在不同的间隔内；

(2) 利用二等分搜索 (bisection search) 取某间隔 (l,u) 的中间点，即令 $\lambda=(l+u)/2$，并利用式 (9.6.21) 进行检验，并重复这一步直至 λ 收敛到所希望的精确度。

例 9.6.1 [496] 令原协方差矩阵为 $\boldsymbol{R}={\rm diag}(50,45,40,35,30,25,20,15,10,5)$。因此，原特征值就是该对角矩阵的对角线元素，而特征向量为单位向量 $\{\boldsymbol{e}_i\},i=1,2,\cdots,10$。现在假定协方差矩阵经过秩 3 修正，即 $\hat{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{R}+\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\rm T}+\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{u}_2^{\rm T}+\boldsymbol{u}_3\boldsymbol{u}_3^{\rm T}$，其中

$$\begin{aligned}\boldsymbol{u}_1=[&0.3563,-0.2105,-0.3559,-0.3566,2.1652,\\&-0.5062,-1.1989,-0.8823,0.7211,-0.0067]^{\rm T}\\\boldsymbol{u}_2=[&-0.5539,-0.4056,-0.3203,-1.0694,-0.5015,\\&1.6070,0.0628,-1.6116,-0.073,-0.5950]^{\rm T}\\\boldsymbol{u}_3=[&0.6176,-1.1828,0.3437,-0.3574,-0.4066,\\&-0.3664,0.8533,-1.5147,-0.7389,2.1763]^{\rm T}\end{aligned}$$

秩 3 修正矩阵 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{u}_1\boldsymbol{u}_1^{\rm T}+\boldsymbol{u}_2\boldsymbol{u}_2^{\rm T}+\boldsymbol{u}_3\boldsymbol{u}_3^{\rm T}$。由此得 $\boldsymbol{S}={\rm diag}(1,1,1)$ 和 $D^+[\boldsymbol{S}]=3$。对于这个例子，最后的特征值为

$$\begin{aligned}\lambda=[&51.1439,47.1839,40.6324,36.9239,36.0696,\\&27.6072,22.1148,20.0423,11.0808,8.6086]\end{aligned}$$

下面说明式 (9.6.21) 是如何将特征值定位在所希望的精确度的。考虑间隔 $(20+\epsilon,25-\epsilon)$，其中，$\epsilon$ 表示所希望的精确度。计算得 $N_{\hat{\boldsymbol{R}}}(25-\epsilon)=4$ 和 $N_{\hat{\boldsymbol{R}}}(20+\epsilon)=2$，这表明在间隔 $(20,25)$ 内有两个特征值。于是，可以将该间隔分为 $(20,22.5)$ 和 $(22.5,25)$。计算式 (9.6.21) 得 $N_{\hat{\boldsymbol{R}}}(22.5-\epsilon)=3$ 和 $N_{\hat{\boldsymbol{R}}}(22.5+\epsilon)=4$，故在 $(20,22.5)$ 和 $(22.5,25)$ 内各有一个特征值。然后，二分法即可用于将特征值计算到所要求的精确度。

表 9.6.1 示出了计算精确度为 10^{-3} 时的迭代步骤的结果，在第 12 步，特征值收敛为 20.0425。

表9.6.1 利用谱分割公式的特征值的二等分搜索的迭代结果[496]

步骤	间 隔	中间点	$N_R(\lambda)$	$D^+[W(\lambda)]$	$N_{\hat{R}}(\lambda)$
1	(20, 21.25)	20.6250	4	2	3
2	(20, 20.625)	20.3125	4	2	3
3	(20, 20.3125)	20.1563	4	2	3
4	(20, 20.1563)	20.0782	4	2	3
5	(20, 20.0782)	20.0391	4	1	2
6	(20.0391, 20.0782)	20.0587	4	2	3
7	(20.0391, 20.0587)	20.0489	4	2	3
8	(20.0391, 20.0489)	20.0440	4	2	3
9	(20.0391, 20.0440)	20.0416	4	1	2
10	(20.0416, 20.0440)	20.0428	4	2	3
11	(20.0416, 20.0428)	20.0422	4	1	2
12	(20.0422, 20.0428)	20.0425	4	2	3

二等分特征值搜索方法的收敛最大步数取决于要搜索的间隔 (l,u) 和所需精度。

3. 特征向量的计算

一旦特征值获得，特征向量即可分两步计算。第一步从 $k\times k$ 齐次 Hermitian 矩阵方程式 (9.6.11) 求出中间向量 $\boldsymbol{y}$。实际上，$\boldsymbol{y}$ 可以作为 $\boldsymbol{W}(\lambda)$ 的 $\mathrm{LDL^H}$ 分解的副产品得到，也就是说，$\boldsymbol{y}$ 是 $\boldsymbol{W}(\lambda)$ 的零向量，其中，λ 是收敛的特征值。第二步是利用式 (9.6.9) 直接计算特征向量 $\boldsymbol{x}$。这种二步法比直接求解原 $N\times N$ 齐次方程组 (9.6.6) 更有效。$\boldsymbol{x}$ 与 $\boldsymbol{y}$ 的显式关系由下式给出：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{x} &= -(\boldsymbol{R}-\lambda\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{U}\boldsymbol{y}\\ &= -\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{D}-\lambda\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{y}\\ &= -\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}\boldsymbol{y}}{d_i-\lambda}\boldsymbol{q}_i\end{aligned} \tag{9.6.22}$$

归一化的 $\boldsymbol{x}$ 给出更新的特征向量

$$\hat{\boldsymbol{q}} = \frac{\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}\|_2} \tag{9.6.23}$$

9.6.2 秩 1 修正

对于秩 1 修正 $\hat{\boldsymbol{R}} = R+\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{H}}$，修正矩阵 $\boldsymbol{E}=\boldsymbol{\alpha}\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{H}}$，且式 (9.6.4) 中 $\boldsymbol{U}=\boldsymbol{\alpha}$ 和 $\boldsymbol{S}=1$。

此时，$\boldsymbol{W}(\lambda)$ 为 1×1 矩阵，它与行列式 $w(\lambda)=\det[\boldsymbol{W}(\lambda)]$ 相同，即

$$w(\lambda)=1+\boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{R}-\lambda\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{\alpha}=1+\sum_{i=1}^{N}\frac{|\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\alpha}|^2}{d_i-\lambda} \tag{9.6.24}$$

这是一个有理多项式，有 N 个根，它们对应于 N 个特征值。假定压缩映射已不再可能，所有 d_i 已经各异，且 $\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\alpha}\neq 0$。在这些条件下，秩 1 修正 Hermitian 矩阵的特征值满足下列交织性质 [356]：

$$d_i<\lambda_i<d_{i-1},\qquad i=1,2,\cdots,N \tag{9.6.25}$$

其中，$d_0=d_1+\|\boldsymbol{\alpha}\|_2^2$。因此，对每一个 λ_i 的搜索间隔可以限定为 $I_i=(d_i,d_{i-1}),i=1,2,\cdots,N$。对于复旧 $\hat{\boldsymbol{R}}=\boldsymbol{R}-\boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\beta}^{\mathrm{H}}$ 的情况，交织公式为

$$d_{i+1}<\lambda_i<d_i,\qquad i=1,2,\cdots,N \tag{9.6.26}$$

其中，$d_{N+1}=d_N-\|\boldsymbol{\beta}\|_2^2$。对每一个 λ 的相应搜索间隔可以限定为 $I_i=(d_{i+1},d_i)$。于是，一种迭代搜索方法可用于 $w(\lambda)$ 以辨识被更新的特征值。函数 $w(\lambda)$ 是一个在其两端点之间的单调增函数，因为其微商

$$w'(\lambda)=\sum_{i=1}^{N}\frac{|\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\alpha}|^2}{(d_i-\lambda)^2}>0 \tag{9.6.27}$$

因此，下面的 Newton 法可用于迭代搜索以辨识第 j 个特征值。为方便计，将间隔的两端点记作 $l=d_j$ 和 $u=d_{j-1}$。所有的特征值都可以用下面的迭代算法并行求出每一个特征值 [33]：

$$\lambda_*^{(k+1)}=\lambda^{(k)}-\frac{w(\lambda^{(k)})}{w'(\lambda^{(k)})} \tag{9.6.28}$$

及

$$\lambda^{(k+1)}=\begin{cases}\lambda_*^{(k+1)}, & 若\ \lambda_*^{(k+1)}\in I_j\\ \frac{\lambda^{(k)}+u}{2}, & 若\ \lambda_*^{(k+1)}>u, \qquad \lambda^{(k)}代替\ l\\ \frac{\lambda^{(k)}+l}{2}, & 若\ \lambda_*^{(k+1)}<l, \qquad \lambda^{(k)}代替\ u\end{cases} \tag{9.6.29}$$

若 $|\lambda^{(k+1)}-\lambda^{(k)}|<\delta\lambda^{(k+1)}$，则停止迭代，其中，$\delta$ 是收敛阈门值。注意，当迭代跑出所规定的区域时，由于梯度大于零，所以它将表明，该方向正是要找的解所在的方向。这样，迭代就可以重新规定一个间隔。Newton 法可以保证收敛，而且这一收敛在解附近是二次型收敛。应当注意，Newton 法的基础是对函数 $w(\lambda)$ 的局部线性逼近。由于 $w(\lambda)$ 是一有理式函数，所以如果直接使用有理多项式作局部逼近，则可望加快收敛速率。

一旦特征值足够精确，特征向量就可用式 (9.6.22) 和式 (9.6.23) 所述的方法求出，其结果为

$$\boldsymbol{x}=-\sum_{i=1}^{N}\frac{\boldsymbol{q}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{\alpha}}{d_i-\lambda}\boldsymbol{q}_i \tag{9.6.30}$$

$$\hat{\boldsymbol{q}}=\frac{\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}\|_2} \tag{9.6.31}$$

9.6.3　秩 2 修正

对于秩 2 修正问题, 式 (9.6.3) 可以表示为

$$\hat{\boldsymbol{R}} = \boldsymbol{R} + [\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}] \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\alpha}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{\beta}^{\mathrm{H}} \end{bmatrix} = \boldsymbol{R} + \boldsymbol{U}\boldsymbol{S}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}} \tag{9.6.32}$$

式中，$\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\beta}]$ 为 $N \times 2$ 酉矩阵，而 $\boldsymbol{S} = \mathrm{diag}(1, -1)$ 为 2×2 对角矩阵。Weinstein-Aronszajn 矩阵 $\boldsymbol{W}(\lambda)$ 由下式给出：

$$\boldsymbol{W}(\lambda) = \boldsymbol{S}^{-1} + \boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q}(\boldsymbol{D} - \lambda\boldsymbol{I})^{-1}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} \tag{9.6.33}$$

令 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}]$ 为 $N \times 2$ 矩阵，则 $\boldsymbol{W}(\lambda)$ 的行列式 $w(\lambda)$ 具有下列表达式：

$$w(\lambda) = \left(1 + \sum_{i=1}^{N} \frac{|y_i|^2}{d_i - \lambda}\right)\left(1 - \sum_{i=1}^{N} \frac{|z_i|^2}{d_i - \lambda}\right) + \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{y_i^* z_i}{d_i - \lambda}\right)\left(\sum_{i=1}^{N} \frac{z_i^* y_i}{d_i - \lambda}\right) \tag{9.6.34}$$

假定所有的压缩映射步骤已执行，即所有的 d_i 已各不相同。联系修正特征值与原特征值的交织性质将比秩 1 修正情况复杂得多。综合秩 1 更新的交织公式 (9.6.25) 和秩 1 复旧的交织公式 (9.6.26)，即有**秩 2 修正**的下列广义交织公式：

$$d_{i+1} < \lambda_i < d_{i-1} \tag{9.6.35}$$

其中，$d_{N+1} = d_N - \|\boldsymbol{\beta}\|_2^2$，$d_0 = d_1 + \|\boldsymbol{\alpha}\|_2^2$。即是说，修正特征值以原协方差矩阵的上一个和下一个特征值为界。这一性质由 DeGroat 与 Roberts [117] 讨论。在这种情况下，每一间隔可能没有一个、只有一个或有两个特征值。幸运的是，可以使用谱分割公式将特征值分隔成互不交连的间隔。一旦特征值被分隔，就可以应用 Newton 方法进行特征值搜索。这一非线性搜索可以用与秩 1 修正情况相同的方法并行实现。

特征向量的确定分两步。

第 1 步：由 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{y}, \boldsymbol{z}]$ 得到向量 $\boldsymbol{y} = [y_1, y_2, \cdots, y_N]^{\mathrm{T}}$ 和 $\boldsymbol{z} = [z_1, z_2, \cdots, z_N]^{\mathrm{T}}$。于是，可以计算

$$a = 1 + \sum_{i=1}^{N} \frac{|y_i|^2}{d_i - \lambda} \tag{9.6.36}$$

$$b = \sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{y}_i^{\mathrm{H}} \boldsymbol{z}_i}{d_i - \lambda} \tag{9.6.37}$$

和

$$v = -\frac{1 + a}{b} \tag{9.6.38}$$

第 2 步：得到特征向量的下列显式表示：

$$\boldsymbol{x} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\boldsymbol{y}_i + v\boldsymbol{z}_i}{d_i - \lambda} q_i \tag{9.6.39}$$

和

$$q = \frac{\boldsymbol{x}}{\|\boldsymbol{x}\|_2} \tag{9.6.40}$$

上面介绍的特征值分解的递推更新很容易推广到信号子空间和噪声子空间的递推更新。假定只有 M 个信号源。对于秩 1 更新的情况，前 $M+1$ 个特征值和特征向量需要更新，后 $N-M-1$ 个特征对保留不变。为了符合 M 个信号源的模型，可采用下列特征值更新公式：

$$\hat{\lambda}_1 \geqslant \cdots \geqslant \hat{\lambda}_M > \hat{\sigma}^2 \tag{9.6.41}$$

其中

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\hat{\lambda}_{M+1} + (N-M-1)\sigma^2}{N-M} \tag{9.6.42}$$

类似地，对于秩 k 更新，前 $M+k$ 个特征对需要修正，其他特征对保留不变。因此，噪声特征值可以更新如下：

$$\hat{\sigma}^2 = \frac{\hat{\lambda}_{M+1} + \cdots + \hat{\lambda}_{M+k} + (N-M-k)\sigma^2}{N-M} \tag{9.6.43}$$

事实上，如果只有 M 个信号源，$\{\hat{\lambda}_{M+i}\}_{i=1}^{k}$ 应该与 σ^2 接近。如不接近，就有可能存在另外一个信号源或目标。这一观察可以用来检测新的信号源。

9.7 基于优化理论的子空间跟踪

考察目标函数 $f(\boldsymbol{W})$ 的最小化，其中，$\boldsymbol{W}$ 为 $n\times r$ 矩阵。对 $\boldsymbol{W}$ 的常用约束有两类：

(1) 正交约束 (orthogonality constraint)：要求 $\boldsymbol{W}$ 满足正交条件 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}_r\ (n \geqslant r)$ 或者 $\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_n\ (n < r)$。满足这种条件的矩阵 $\boldsymbol{W}$ 称为半正交矩阵。

(2) 齐次性约束 (homogeneity constraint)：要求 $J(\boldsymbol{W}) = J(\boldsymbol{W}\boldsymbol{Q})$，其中，$\boldsymbol{Q}$ 为 $r\times r$ 正交矩阵。

下面分别研究两类最优化问题：一类同时使用正交约束和齐次性约束，另一类只使用正交约束。

9.7.1 Grassmann 流形和 Stiefel 流形

本节分析具有正交约束的最小化问题 $\min J(\boldsymbol{W})$ 的解 $\boldsymbol{W}$ 的集合。先介绍线性流形的概念。

定义 9.7.1 (线性流形) 令 H 是 V 空间的子空间，$\mathcal{L}$ 代表 H 内有限个元素的所有线性组合的全体，即

$$\mathcal{L} = \left\{ \xi : \xi = \sum_{i=1}^{n} a_i \eta_i,\ \eta_i \in H \right\}$$

称 $\mathcal{L}$ 是由 H 张成的线性流形。

在矩阵分析与最优化理论中，称两个矩阵为等价矩阵，若它们的列向量张成的子空间相同。换言之，等价的矩阵集合具有相同的列空间，即子空间相对于基的任意选择是不变的。在这个意义上，这类子空间也称不变子空间。所有相同的子空间组成等价子空间类。

令 $n\times r$ 矩阵 $\boldsymbol{W}$ 具有满列秩，其列空间 $H=\mathrm{Col}(\boldsymbol{W})$，并令 $\boldsymbol{x}$ 是 C^n 空间的一任意向量，则 $\boldsymbol{x}$ 到 H 子空间的投影为

$$\boldsymbol{P}_H\boldsymbol{x}=\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

令 $r\times r$ 矩阵 $\boldsymbol{M}$ 非奇异，且 $n\times r$ 矩阵 $\boldsymbol{WM}$ 的列空间 $S=\mathrm{Col}(\boldsymbol{WM})$，则 $\boldsymbol{x}$ 到 S 子空间的投影为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_S\boldsymbol{x}&=\boldsymbol{WM}[(\boldsymbol{WM})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{WM})]^{-1}(\boldsymbol{WM})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\\&=\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}\\&=\boldsymbol{P}_H\boldsymbol{x}\end{aligned}$$

由于向量 $\boldsymbol{x}$ 到子空间 H 和 S 的投影相等，故称 H 和 S 是两个等价子空间，或者称 $n\times r$ 满列秩矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的列空间 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{W})$ 是相对于 $r\times r$ 非奇异矩阵 $\boldsymbol{M}$ 不变的子空间。

类似地，向量 $\boldsymbol{x}$ 到具有满行秩的 $n\times r$ 矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的行空间 $H_1=\mathrm{Row}(\boldsymbol{W})$ 上的投影

$$\boldsymbol{xP}_{H_1}=\boldsymbol{xW}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{WW}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{W}$$

若 $\boldsymbol{N}$ 是一个 $n\times n$ 非奇异矩阵，则 $\boldsymbol{x}$ 到行空间 $S_1=\mathrm{Row}(\boldsymbol{NW})$ 上的投影

$$\begin{aligned}\boldsymbol{xP}_{S_1}&=\boldsymbol{xW}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{N}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{NWW}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{N}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{NW}\\&=\boldsymbol{xW}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{WW}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{W}\\&=\boldsymbol{xP}_{H_1}\end{aligned}$$

即 H_1 和 S_1 为等价子空间。就是说，$n\times r$ 满行秩矩阵的行空间 $\mathrm{Row}(\boldsymbol{W})$ 是相对于 $n\times n$ 非奇异矩阵 $\boldsymbol{N}$ 不变的子空间。

下面考察不变子空间的集合。

1. Grassmann *流形*

围绕子空间 H 展开的理论分析，其核心问题往往集中体现在另一空间 V 的任意向量 $\boldsymbol{x}$ 到子空间 H 的投影分析，因为这一投影涉及信号的最优滤波、最优估计、干扰对消等一系列应用。在这些应用中，到子空间的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_H$ 和正交投影矩阵 $\boldsymbol{P}_H^{\perp}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_H$ 起着关键的作用。当 H 是矩阵 $\boldsymbol{W}$ 的列 (或者行) 向量张成的子空间即列 (或者行) 空间时，常将 $\boldsymbol{W}$ 的投影矩阵视为子空间 H 的代表。因此，不变子空间也可以通过投影矩阵作解释。

(1) “高瘦”半正交矩阵 (tall-skinny semi-orthogonal matrix)

当 $n \geqslant r$，并且对矩阵 $\boldsymbol{W}_{n\times r}$ 加有正交约束 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}_r$ 时，$\boldsymbol{W}$ 的列空间 $H = \mathrm{Col}(\boldsymbol{W})$ 常可以用投影矩阵

$$\boldsymbol{P}_H = \boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}$$

等价描述。因此，不变的列空间 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{W})$ 可等价描述为矩阵乘积 $\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}$ 不变。就是说，当两个 $n\times r$ 半正交矩阵 $\boldsymbol{W}_1 \neq \boldsymbol{W}_2$ 不同，但却满足条件 $\boldsymbol{W}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_1 = \boldsymbol{W}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_2$ 时，矩阵 $\boldsymbol{W}_1$ 和 $\boldsymbol{W}_2$ 就是等价矩阵，因为它们的列空间相同。

(2) “矮”半正交矩阵 (short semi-orthogonal matrix)

当 $n < r$，并且对矩阵 $\boldsymbol{W}_{n\times r}$ 加有正交约束 $\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_n$ 时，$\boldsymbol{W}$ 的行空间 $H = \mathrm{Row}(\boldsymbol{W})$ 常可以用投影矩阵

$$\boldsymbol{P}_H = \boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}$$

等价描述。因此，不变的行空间 $\mathrm{Row}(\boldsymbol{W})$ 可等价描述为矩阵乘积 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}$ 不变。换言之，满足 $\boldsymbol{W}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_1 = \boldsymbol{W}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_2$ 的两个不同矩阵 $\boldsymbol{W}_1$ 和 $\boldsymbol{W}_2$ 相互等价。

引理 9.7.1 假定 $n\times r$ 矩阵 $\boldsymbol{W}_1 = \boldsymbol{W}_2\boldsymbol{Q}$，其中，$n \geqslant r$，$\boldsymbol{Q}$ 是 $r\times r$ 正交矩阵，并且 $H_1 = \mathrm{Col}(\boldsymbol{W}_1)$ 和 $H_2 = \mathrm{Col}(\boldsymbol{W}_2)$，则 $\boldsymbol{P}_{H_1} = \boldsymbol{P}_{H_2}$，从而 $\boldsymbol{W}_1$ 和 $\boldsymbol{W}_2$ 等价。

证明 计算到 $\boldsymbol{W}_1 = \boldsymbol{W}_2\boldsymbol{Q}$ 的列空间 H_1 的投影矩阵，得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_{H_1} &= (\boldsymbol{W}_2\boldsymbol{Q})[(\boldsymbol{W}_2\boldsymbol{Q})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{W}_2\boldsymbol{Q})]^{-1}(\boldsymbol{W}_2\boldsymbol{Q})^{\mathrm{H}} \\ &= \boldsymbol{W}_2(\boldsymbol{W}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_2)^{-1}\boldsymbol{W}_2^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}_{H_2}\end{aligned}$$

由于列空间 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{W}_1)$ 与 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{W}_2)$ 相同，故矩阵 $\boldsymbol{W}_1$ 与 $\boldsymbol{W}_2$ 等价。 ■

上述引理表明，两个矩阵等价或者张成相同的列空间，若一个矩阵等于另外一个矩阵右乘一个正交矩阵。特别地，若 $\boldsymbol{W}_{m\times n}$ 满足正交约束条件 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}_r$ 和齐次性约束条件 $J(\boldsymbol{W}) = J(\boldsymbol{W}\boldsymbol{Q})$，其中，$\boldsymbol{Q}$ 为 $r\times r$ 任意正交矩阵，则极小化问题 $\min J(\boldsymbol{W})$ 的解不是一个 $\boldsymbol{W}$ 矩阵，而是由 $\boldsymbol{W}\boldsymbol{Q}$ 组成的矩阵集合。矩阵集合内的任何一个矩阵的列向量都张成相同的 C^r 子空间。C^n 内的这一子空间称为 Grassmann 流形，用符号 $Gr(n,r)$ 表示，即有

$$Gr(n,r) = \{\boldsymbol{W} \in C^{n\times r} : \boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}_r,\ \boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}} = \text{同一矩阵}\} \tag{9.7.1}$$

Grassmann 流形是 Grassmann 于 1848 年提出的，但当时的表示比较模糊，以至于许多年之后，才被人们认识 [6]。Grassmann 流形的原始定义可以在文献 [187, Chap.3，Sec. 1] 中找到。

总结以上讨论，可以得出以下结论：对于极小化问题

$$\min J(\boldsymbol{W}) \tag{9.7.2}$$

约束条件为

$$\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}_r, \quad J(\boldsymbol{W}) = J(\boldsymbol{W}\boldsymbol{Q}), \quad \boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_r \tag{9.7.3}$$

其解不是单个矩阵，而是称为 Grassmann 流形的矩阵集合。就是说，Grassmann 流形的任何一个点都是同时具有正交约束和齐次性约束的极小化问题的解。

Grassmann 流形在最优化算法、不变子空间计算、物理计算、子空间跟踪等中有着重要的应用，其几何特性由 Edelman 等人于 1998 年给出了比较系统的解释 [142]。

2. Stiefel 流形

下面考虑只有正交约束的最小化问题

$$\min J(\boldsymbol{W}) \quad \text{s.t.} \quad \boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}_r \tag{9.7.4}$$

式中，s.t. 表示“约束条件为”。上述最优化问题的解为 $n \times r$ 半正交矩阵的集合。所有 $n \times r$ 半正交矩阵的集合称为 Stiefel 流形，用符号 $St(n, r)$ 表示，即

$$St(n,r) = \{\boldsymbol{W} \in C^{n\times r} : \boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{I}_r\} \tag{9.7.5}$$

它是 Stiefel 在 1930 年代研究拓扑时提出的 [434]。Stiefel 还与 Hestens 一起于 1952 年提出了著名的共轭梯度算法 [215]。

比较 Grassmann 流形与 Stiefel 流形之间的联系与区别是有趣的。

(1) Stiefel 流形 $St(n, r)$ 是 $n \times r$ “高瘦”半正交矩阵的集合；而 Grassmann 流形 $Gr(n, r)$ 则由 Stiefel 流形 $St(n, r)$ 中那些张成相同列空间的矩阵组成。

(2) Stiefel 流形 $St(n, r)$ 上的一个点由一个 $n \times r$ 半正交矩阵表示，它是唯一确定的；而 Grassmann 流形 $Gr(n, r)$ 上的一个点是一个线性子空间，张成该子空间的矩阵存在多种选择。换言之，Grassmann 流形的点是 $n \times r$ 半正交矩阵的等价类，其中的任何两个矩阵都是等价的，即一个矩阵等于另外一个矩阵右乘一个 $r \times r$ 正交矩阵。

所有 $r \times r$ 正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的集合称为正交群 (orthogonal group)，用符号 O_r 表示，即有

$$O_r = \{\boldsymbol{Q}_r \in C^{r\times r} : \boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{Q}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{I}_r\} \tag{9.7.6}$$

正交群、Grassmann 流形与 Stiefel 流形是与正交约束密切相关的三种子空间流形。下面研究这三种子空间流形之间的关系。

首先，令 $\boldsymbol{W}$ 是 Stiefel 流形上的一个点，即 $\boldsymbol{W} \in St(n,r)$ 是一个 $n \times r$ 半正交矩阵。收集所有满足正交条件 $\boldsymbol{W}_\perp^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}_\perp = \boldsymbol{I}_{n-r}$ 和 $\boldsymbol{W}_\perp^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W} = \boldsymbol{O}_{(n-r)\times r}$ 的 $n \times (n-r)$ 矩阵 $\boldsymbol{W}_\perp \in St(n, n-r)$，则 $[\boldsymbol{W}, \boldsymbol{W}_\perp]$ 构成一正交群 O_n。如果令 $\boldsymbol{Q}$ 是满足 $\boldsymbol{W}_\perp\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{O}$ 的任意一个 $(n-r)\times(n-r)$ 正交矩阵，则 $\boldsymbol{Q}$ 的集合是另一正交群 O_{n-r}。注意到矩阵乘积

$$[\boldsymbol{W}, \boldsymbol{W}_\perp]\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}\\ \boldsymbol{Q}\end{bmatrix} = \boldsymbol{W}$$

这表明，半正交矩阵 $\boldsymbol{W}_{m\times r}$ 可以通过 $n \times n$ 正交群 O_n 和 $(n-r)\times(n-r)$ 正交群 O_{n-r} 识别。由上式的矩阵乘法知，Stiefel 流形 $St(n, r)$ 上的一个点可以用两个正交群的

商 O_n/O_{n-r} 作表示形式，即有

$$St(n,r) = O_n/O_{n-r} \tag{9.7.7}$$

其次，如果我们使用半正交矩阵 $\boldsymbol{W}_{n\times r}$ 表示 Stiefel 流形上的一个点，则满足 $\boldsymbol{W} = \boldsymbol{U}_s\boldsymbol{Q}$ ($\boldsymbol{Q}$ 为 $r\times r$ 任意正交矩阵) 或 $\boldsymbol{U}_s = \boldsymbol{W}\boldsymbol{Q}^{-1}$ 的所有矩阵 $\boldsymbol{U}_s$ 组成 Grassmann 流形 $Gr(n,r)$ 的一个点 (等价子空间类)。因此，若将逆矩阵运算视为矩阵除法，则可以将 Grassmann 流形 $Gr(n,r)$ 表示成 Stiefel 流形 $St(n,r)$ 与正交矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的商，即有

$$Gr(n,r) = St(n,r)/O_r \tag{9.7.8}$$

式中，O_r 表示 $r\times r$ 正交群。若将式 (9.7.7) 代入式 (9.7.8)，又可将 Grassmann 流形表示为正交群的商：

$$Gr(n,r) = O_n/(O_r\times O_{n-r}) \tag{9.7.9}$$

以上关于正交群、Grassmann 流形和 Stiefel 流形三种子空间流形的讨论可以总结为表 9.7.1 的形式。

表 9.7.1 子空间流形的表示 [142]

子空间流形	符号	矩阵表示	商 表 示
正交群	O_n	$n\times n$ 矩阵	
Stiefel 流形	$St(n,r)$	$n\times r$ 矩阵	O_n/O_{n-r}
Grassmann 流形	$Gr(n,r)$	无	$St(n,r)/O_r$ 或者 $O_n/(O_r\times O_{n-r})$

下面讨论 Stiefel 流形、Grassmann 流形与 Rayleigh 商之间的关系。

定义 9.7.2[211],[7] 令 $\boldsymbol{X}\in St(n,r)$ 是一个 $n\times r$ 半正交矩阵，且 $\boldsymbol{A}$ 为 $n\times n$ 维 Hermitian 矩阵，则

$$\boldsymbol{R}_A(X) = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X} \tag{9.7.10}$$

称为 $\boldsymbol{A}$ 的矩阵 Rayleigh 商。矩阵 Rayleigh 商的迹

$$\rho_A(\boldsymbol{X}) = \mathrm{tr}(\boldsymbol{R}_A(X)) = \mathrm{tr}\left(\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\right) \tag{9.7.11}$$

$$= \mathrm{tr}\left((\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1/2}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1/2}\right) \tag{9.7.12}$$

称为推广的 (标量) Rayleigh 商。

与 Rayleigh 商 $\dfrac{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}}{\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}}$ 通常约定 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=1$ 相类似，矩阵 Rayleigh 商假设 $\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X}=\boldsymbol{I}$，即 $\boldsymbol{X}$ 是 Stiefel 流形上的点。换言之，矩阵 Rayleigh 商利用 Stiefel 流形定义。

推广的 Rayleigh 商保留了经典 Rayleigh 商的以下重要特性。

命题 9.7.1 矩阵 Rayleigh 商定义式 (9.7.10) 和推广的 Rayleigh 商定义式 (9.7.12) 满足以下性质：

(1) 齐次性 Rayleigh 商 $\rho_A(\boldsymbol{X}) = \rho_A(\boldsymbol{XM})$ 对所有非奇异矩阵 $\boldsymbol{M}$ 成立。这意味着，若 $\text{Col}(\boldsymbol{W}_1) = \text{Col}(\boldsymbol{W}_2)$，则 $\rho_A(\boldsymbol{W}_1) = \rho_A(\boldsymbol{W}_2)$。换言之，推广的 Rayleigh 商定义了 Grassmann 流形上的一个标量场 (scalar field)。

(2) 平稳性 推广的 Rayleigh 商 $\rho_A(\boldsymbol{X})$ 关于 $\boldsymbol{X}$ 的梯度矩阵 $\nabla\rho_A(\boldsymbol{X}) = \boldsymbol{O}$，当且仅当 $\text{col}(\boldsymbol{X})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的不变子空间，即 $\text{Col}(\boldsymbol{AX}) \subset \text{Col}(\boldsymbol{X})$。

(3) 最小残差 $\|\boldsymbol{AX} - \boldsymbol{XB}\|_F^2 \geqslant \|\boldsymbol{AX}\|_F^2 - \|\boldsymbol{XR}_A(X)\|_F^2$，等号成立，当且仅当 $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{R}_A(X)$。因此，$\boldsymbol{B} = \boldsymbol{R}_A(X)$ 是 $\min\|\boldsymbol{AX} - \boldsymbol{XB}\|_F^2$ 的唯一解。

证明 见文献 [7]。

上述讨论可以总结为 Stiefel 流形、Grassmann 流形与 Rayleigh 商之间的下列关系：

(1) 矩阵 Rayleigh 商 $\boldsymbol{R}_A(X) = (\boldsymbol{X}^{\text{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\text{H}}\boldsymbol{AX}$ 利用 Stiefel 流形 (即 $\boldsymbol{X} \in St(n,r)$) 定义。

(2) 推广的 Rayleigh 商定义了 Grassmann 流形上的一个标量场。

9.7.2 投影逼近子空间跟踪

下面证明，具有正交性约束 $\boldsymbol{W}_{n\times r}^{\text{H}}\boldsymbol{W}_{n\times r} = \boldsymbol{I}_r$ 和齐次性约束 $J(\boldsymbol{W}) = J(\boldsymbol{WQ}_{r\times r})$ 的极小化问题 $\min J(\boldsymbol{W})$ 可以等价为一个无约束的最优化问题。

令 $\boldsymbol{C} = \text{E}\{\boldsymbol{xx}^{\text{H}}\}$ 表示 $n\times 1$ 随机向量的自相关矩阵，目标函数为

$$J(\boldsymbol{W}) = \text{E}\{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{x}\|^2\} \tag{9.7.13}$$

或写作

$$\begin{aligned}
J(\boldsymbol{W}) &= \text{E}\{\|\boldsymbol{x} - \boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{x}\|^2\} \\
&= \text{E}\{(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{x})^{\text{H}}(\boldsymbol{x} - \boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{x})\} \\
&= \text{E}\{\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{x}\} - 2\text{E}\{\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{x}\} + \text{E}\{\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{x}\}
\end{aligned} \tag{9.7.14}$$

注意到

$$\begin{aligned}
\text{E}\{\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{x}\} &= \sum_{i=1}^{n}\text{E}\{|x_i|^2\} = \text{tr}\left(\text{E}\{\boldsymbol{xx}^{\text{H}}\}\right) = \text{tr}(\boldsymbol{C}) \\
\text{E}\{\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{x}\} &= \text{tr}\left(\text{E}\{\boldsymbol{W}^{\text{H}}\boldsymbol{xx}^{\text{H}}\boldsymbol{W}\}\right) = \text{tr}(\boldsymbol{W}^{\text{H}}\boldsymbol{CW}) \\
\text{E}\{\boldsymbol{x}^{\text{H}}\boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{WW}^{\text{H}}\boldsymbol{x}\} &= \text{tr}\left(\text{E}\{\boldsymbol{W}^{\text{H}}\boldsymbol{Wxx}^{\text{H}}\boldsymbol{W}^{\text{H}}\boldsymbol{W}\}\right) = \text{tr}(\boldsymbol{W}^{\text{H}}\boldsymbol{CWW}^{\text{H}}\boldsymbol{W})
\end{aligned}$$

则目标函数可以用迹函数表示为

$$J(\boldsymbol{W}) = \text{tr}(\boldsymbol{C}) - 2\text{tr}(\boldsymbol{W}^{\text{H}}\boldsymbol{CW}) + \text{tr}(\boldsymbol{W}^{\text{H}}\boldsymbol{CWW}^{\text{H}}\boldsymbol{W}) \tag{9.7.15}$$

式中，$\boldsymbol{W}$ 是 $n\times r$ 矩阵，假定其秩等于 r。下面考虑极小化问题 $\min J(\boldsymbol{W})$。与之相关的重要问题是：

(1) 是否存在 $J(\boldsymbol{W})$ 的全局极小点 $\boldsymbol{W}$?

(2) 该极小点 $\boldsymbol{W}$ 与自相关矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的信号子空间有何关系?

(3) 是否存在 $J(\boldsymbol{W})$ 的其他局部极小点?

Yang 证明了下面的定理，给出了以上问题的答案 [485]。

定理 9.7.1 $\boldsymbol{W}$ 是 $J(\boldsymbol{W})$ 的一个平稳点，当且仅当 $\boldsymbol{W}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{Q}$，其中，$\boldsymbol{U}_r\in C^{n\times r}$ 由自相关矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的 r 个不同的特征向量组成，并且 $\boldsymbol{Q}\in C^{r\times r}$ 为任意酉矩阵。在每一个平衡点，目标函数 $J(\boldsymbol{W})$ 的值等于特征向量不在 $\boldsymbol{U}_r$ 的那些特征值之和。

在给出定理证明之前，先介绍下面的引理。

引理 9.7.2 对于 $n\times n$ 实对称矩阵 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$，若 $\boldsymbol{A}$ 正定，则 $\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{O}$ 意味着 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{O}$。

证明 [485] 令 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{U}_B\boldsymbol{\Sigma}_B\boldsymbol{U}_B^{\mathrm{T}}$ 是 $\boldsymbol{B}$ 的特征值分解，其特征值为 λ_i^B。令 $\bar{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{U}_B^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AB}$ 的元素为 $\bar{a}_{ij}$，则 $\boldsymbol{AB}+\boldsymbol{BA}=\boldsymbol{O}$ 意味着 $\bar{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{\Sigma}_B+\boldsymbol{\Sigma}_B\bar{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{O}$，或用对角线元素表示为 $2\bar{a}_{ij}\lambda_i^B=0$。由于 $\boldsymbol{A}$ 正定，故其对角元素 $\bar{a}_{ii}>0,\forall i=1,2,\cdots,n$。于是，有 $\lambda_i^B=0,\ i=1,2,\cdots,n$，即 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{O}$。

定理 9.7.1 的证明 [485] (1) 首先证明定理 9.7.1 对实数据成立。利用第 5 章的迹函数的偏导公式

$$\frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{AW})}{\partial \boldsymbol{W}}=(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{W},\quad \frac{\partial \mathrm{tr}(\boldsymbol{BWW}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D})}{\partial \boldsymbol{W}}=(\boldsymbol{DB}+\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{D}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{W}$$

并分别令 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{CWW}^{\mathrm{T}}$，$\boldsymbol{B}=\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C},\ \boldsymbol{D}=\boldsymbol{W}$，则

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{W}}\mathrm{tr}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{CWW}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W})&=(\boldsymbol{CWW}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{WW}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C})\boldsymbol{W}+(\boldsymbol{WW}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}+\boldsymbol{CWW}^{\mathrm{T}})\boldsymbol{W}\\&=2(\boldsymbol{CWW}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{WW}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C})\boldsymbol{W}\end{aligned}$$

式中，利用了自相关矩阵 $\boldsymbol{C}$ 为对称矩阵这一事实。因此，求式 (9.7.15) 关于 $\boldsymbol{W}$ 的偏导，则有

$$\frac{1}{2}\nabla J(\boldsymbol{W})=[-2\boldsymbol{C}+\boldsymbol{CWW}^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{WW}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}]\boldsymbol{W}\tag{9.7.16}$$

若 $\boldsymbol{W}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{Q}$，其中，$\boldsymbol{U}_r$ 由 $\boldsymbol{C}$ 的任意 r 个不同的特征向量，且 $\boldsymbol{Q}$ 为正交矩阵，则式 (9.7.16) 变为

$$\frac{1}{2}\nabla J(\boldsymbol{W})=[-2\boldsymbol{C}+\boldsymbol{CU}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{T}}+\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}]\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{Q}=(\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{T}}\boldsymbol{CU}_r-\boldsymbol{CU}_r)\boldsymbol{Q}$$

令

$$\boldsymbol{C}=[\boldsymbol{U}_r,\tilde{\boldsymbol{U}}_{n-r}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_r & \boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{O} & \tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n-r}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{T}}\\ \tilde{\boldsymbol{U}}_{n-r}\end{bmatrix}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{T}}+\tilde{\boldsymbol{U}}_{n-r}\tilde{\boldsymbol{\Sigma}}_{n-r}\tilde{\boldsymbol{U}}_{n-r}^{\mathrm{T}}$$

注意到 $\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{T}}\boldsymbol{U}_r=\boldsymbol{I}_r$ 和 $\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{T}}\tilde{\boldsymbol{U}}_{n-r}=\boldsymbol{O}_{r\times(n-r)}$，并代入 $\boldsymbol{C}$ 的上述表示式，经计算后，即有

$$\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{T}}\boldsymbol{CU}_r-\boldsymbol{CU}_r=\boldsymbol{O}\ \Rightarrow\ \nabla J(\boldsymbol{W})=\boldsymbol{O}$$

即 $\boldsymbol{W}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{Q}$ 是目标函数 $J(\boldsymbol{W})$ 的一个平衡点。

反之，由式 (9.7.16) 知，$\nabla J(\boldsymbol{W})=\boldsymbol{O}$ 意味着

$$\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\frac{1}{2}\nabla J(\boldsymbol{W})=\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}-\boldsymbol{I})+(\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}-\boldsymbol{I})\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{W}=\boldsymbol{O}$$

因为 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{W}$ 和 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}$ 均为实对称矩阵，且 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{W}$ 正定，由引理 9.7.2 立即得 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}=\boldsymbol{I}$。将这一条件代入式 (9.7.16)，即知 $\nabla J(\boldsymbol{W})=\boldsymbol{O}$ 等价于 $\boldsymbol{C}\boldsymbol{W}=\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{W}$。令 $\boldsymbol{C}$ 的特征值分解为 $(\boldsymbol{W}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}(\boldsymbol{W}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}})=\boldsymbol{\Sigma}_r$ 或者 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{W}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{Q}$，并且 $\boldsymbol{U}_r$ 是与 $\boldsymbol{\Sigma}_r$ 的对角元素 (即 $\boldsymbol{C}$ 的特征值) 对应的特征向量，则立即有 $\boldsymbol{W}\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}=\boldsymbol{U}_r$ 或 $\boldsymbol{W}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{Q}$。不妨令 $\boldsymbol{\Sigma}_r=\mathrm{diag}(\lambda_1,\lambda_2,\cdots,\lambda_r)$，其中，特征值 λ_i 随意排列。将 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{W}=\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{C}\boldsymbol{W}=\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{Q}$ 代入式 (9.7.15)，得

$$\begin{aligned}J(\boldsymbol{W})&=\mathrm{tr}(\boldsymbol{C})-2\mathrm{tr}(\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{Q})+\mathrm{tr}(\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{Q})\\&=\mathrm{tr}(\boldsymbol{C})-\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}_r)\\&=\sum_{i=r+1}^{n}\lambda_i\end{aligned}$$

式中，利用了矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 的正交性和迹函数的性质 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{Q})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}_r\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{\Sigma}_r)$。

(2) 对于复数据情况，令 $\nabla_{R,i}$ 和 $\nabla_{I,i}$ 分别表示相对于 $\boldsymbol{w}_i$ 的实部和虚部的复梯度算子。复梯度算子定义为

$$\nabla_i=\frac{1}{2}\left[\nabla_{R,i}+\mathrm{j}\,\nabla_{I,i}\right]$$

显然，$\nabla_{R,i}J=\nabla_{I,i}J=\mathbf{0},\forall i$ 等价为 $\nabla J=\boldsymbol{O}$，其中，$\nabla=[\nabla_1,\nabla_2,\cdots,\nabla_r]$。于是，经过类似的运算后，可以得到与式 (9.7.16) 类似的结果

$$\nabla J(\boldsymbol{W})=[-2\boldsymbol{C}+\boldsymbol{C}\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}+\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{C}]\boldsymbol{W}\tag{9.7.17}$$

于是，复数据情况下定理 9.7.1 的证明与实数据情况 (1) 类似。 ■

定理 9.7.2 目标函数 $J(\boldsymbol{W})$ 的所有平稳点都是鞍点，除非 $\boldsymbol{U}_r$ 由自相关矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的 r 个主特征向量组成。在这一特殊情况下，$J(\boldsymbol{W})$ 达到全局极小值。

证明 参见文献 [485]。

Yang [485] 建立的上述定理 9.7.1 和定理 9.7.2 表明了以下事实：

(1) 定理 9.7.2 表明，当 $\boldsymbol{W}$ 的列空间等于信号子空间，即 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{W})=\mathrm{Span}(\boldsymbol{U}_r)$ 时，目标函数 $J(\boldsymbol{W})$ 达到全局极小值，并且目标函数没有其他任何局部极小值。

(2) 虽然在定义目标函数和无约束极小化问题时，没有要求 $\boldsymbol{W}$ 的列正交，但是两个定理却表明，式 (9.7.13) 的目标函数 $J(\boldsymbol{W})$ 的极小化将自动导致 $\boldsymbol{W}$ 为半正交矩阵，即满足 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}=\boldsymbol{I}$。

(3) 由目标函数的定义式 (9.7.13) 易知，$J(\boldsymbol{W})=J(\boldsymbol{W}\boldsymbol{Q})$ 对于所有 $r\times r$ 酉矩阵 $\boldsymbol{Q}$ 成立，即目标函数自动满足齐次性约束。

(4) 由于式 (9.7.13) 定义的目标函数自动满足齐次性约束，并且其极小化自动导致 $\boldsymbol{W}$ 满足正交约束 $\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W}=\boldsymbol{I}$，故目标函数极小化的解 $\boldsymbol{W}$ 不是唯一确定的，而是 Grassmann 流形上的点。

(5) 虽然 $\boldsymbol{W}$ 不是唯一确定的，但投影矩阵 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{W}(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{W})^{-1}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{H}}$ 是唯一确定的。就是说，不同的解张成相同的列空间。

(6) 当 $r=1$ 即目标函数为向量 $\boldsymbol{w}$ 的函数时，$J(\boldsymbol{w})$ 极小化的解 $\boldsymbol{w}$ 为自相关矩阵 $\boldsymbol{C}$ 与最大特征值对应的特征向量。

因此，具有正交性约束和齐次性约束的目标函数 $J(\boldsymbol{W})$ 的极小化求解变为奇异值分解或特征值分解问题：

(1) 利用观测数据向量 $\boldsymbol{x}(k)$ 构造数据矩阵 $\boldsymbol{X}=[\boldsymbol{x}(1),\boldsymbol{x}(2),\cdots,\boldsymbol{x}(N)]$，再计算 $\boldsymbol{X}$ 的奇异值分解，判断数据矩阵的有效秩 r，得到 r 个主奇异值和与之对应的左奇异向量矩阵 $\boldsymbol{U}_r$。极小化问题的最优解为 $\boldsymbol{W}=\boldsymbol{U}_s$。

(2) 计算自相关矩阵 $\boldsymbol{C}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}$ 的特征值分解，得到与 r 个主特征值对应的特征向量矩阵 $\boldsymbol{U}_r$，它便是极小化问题的最优解。

然而，在实际应用中，自相关矩阵 $\boldsymbol{C}$ 有可能是随时间变化的，从而，其特征值和特征向量也是随时间变化的。由式 (9.7.17) 知，在时变的情况下目标函数 $J(\boldsymbol{W}(t))$ 的瞬时梯度矩阵为

$$\begin{aligned}\nabla J(\boldsymbol{W}(t))=&[-2\boldsymbol{C}(t)+\boldsymbol{C}(t)\boldsymbol{W}(t-1)\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(t-1)+\\&\boldsymbol{W}(t-1)\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(t-1)\boldsymbol{C}(t)]\boldsymbol{W}(t-1)\end{aligned}$$

将 $\boldsymbol{C}(t)=\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)$ 代入上式，并注意到 $\boldsymbol{W}(t)$ 自动满足半正交约束 $\boldsymbol{W}(t)\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(t)=\boldsymbol{I}$，即可得到求解极小化问题的梯度下降法如下：

$$\boldsymbol{y}(t)=\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(t)\boldsymbol{x}(t) \tag{9.7.18}$$

$$\boldsymbol{W}(t)=\boldsymbol{W}(t-1)+\mu[\boldsymbol{x}(t)-\boldsymbol{W}(t-1)\boldsymbol{y}(t)]\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(t) \tag{9.7.19}$$

但是，这一更新 $\boldsymbol{W}(t)$ 的梯度下降算法收敛比较慢，跟踪时变子空间的能力也比较差。更好的方法是下面的递推最小二乘算法。

定义指数加权的目标函数

$$J_1(\boldsymbol{W}(t))=\sum_{i=1}^{t}\beta^{t-i}\|\boldsymbol{x}(i)-\boldsymbol{W}(t)\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(t)\boldsymbol{x}(i)\|^2 \tag{9.7.20}$$

$$=\sum_{i=1}^{t}\beta^{t-i}\|\boldsymbol{x}(i)-\boldsymbol{W}(t)\boldsymbol{y}(i)\|^2 \tag{9.7.21}$$

式中，$0<\beta\leqslant 1$ 称为遗忘因子，而 $\boldsymbol{y}(i)=\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(t)\boldsymbol{x}(i)$。

由自适应滤波理论知，极小化问题 $\min J_1(\boldsymbol{W})$ 的最优解为 Wiener 滤波器：

$$\boldsymbol{W}(t)=\boldsymbol{C}_{xy}(t)\boldsymbol{C}_{yy}^{-1}(t) \tag{9.7.22}$$

式中，互相关矩阵 $\boldsymbol{C}_{xy}(t)$ 和自相关矩阵 $\boldsymbol{C}_{yy}(t)$ 可以递推：

$$\boldsymbol{C}_{xy}(t)=\sum_{i=1}^{t}\beta^{t-i}\boldsymbol{x}(i)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(i)=\beta\boldsymbol{C}_{xy}(t-1)+\boldsymbol{x}(t)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(i) \tag{9.7.23}$$

$$\boldsymbol{C}_{yy}(t)=\sum_{i=1}^{t}\beta^{t-i}\boldsymbol{y}(i)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(i)=\beta\boldsymbol{C}_{yy}(t-1)+\boldsymbol{y}(t)\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(i) \tag{9.7.24}$$

将式 (9.7.23) 和式 (9.7.24) 代入式 (9.7.22)，并运用矩阵求逆引理，即可得到投影逼近的子空间跟踪 (projection approximation subspace tracking，PAST) 算法如下。

算法 9.7.1 (投影逼近子空间跟踪 (PAST) 算法)[485]

选择初始化矩阵 $\boldsymbol{P}(0)$ 和 $\boldsymbol{W}(0)$

对 $t=1,2,\cdots$，计算

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{y}(t)&=\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(t-1)\boldsymbol{x}(t)\\
\boldsymbol{h}(t)&=\boldsymbol{P}(t-1)\boldsymbol{y}(t)\\
\boldsymbol{g}(t)&=\boldsymbol{h}(t)/[\beta+\boldsymbol{y}^{\mathrm{H}}(t)\boldsymbol{h}(t)]\\
\boldsymbol{P}(t)&=\frac{1}{\beta}\mathrm{Tri}[\boldsymbol{P}(t-1)-\boldsymbol{g}(t)\boldsymbol{h}^{\mathrm{H}}(t)]\\
\boldsymbol{e}(t)&=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(t-1)\boldsymbol{y}(t)\\
\boldsymbol{W}&=\boldsymbol{W}(t-1)+\boldsymbol{e}(t)\boldsymbol{g}^{\mathrm{H}}(t)
\end{aligned}$$

式中，$\mathrm{Tri}[\boldsymbol{A}]$ 表示只计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的上 (或下) 三角部分，然后将上 (或下) 三角部分复制为矩阵的下 (或上) 三角部分。

PAST 算法从数据向量中提取信号子空间，是一种主分量分析方法。特别地，若上述算法的第一式用

$$\boldsymbol{y}(t)=g\left(\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}(t-1)\boldsymbol{x}(t)\right) \tag{9.7.25}$$

取代，其中，$g(\boldsymbol{z}(t))=[g(x_1(t)),g(x_2(t)),\cdots,g(x_n(t))]^{\mathrm{T}}$ 为非线性函数，则可得到一类称为非线性主分量分析的盲信号分离算法。非线性主分量分析的 LMS 算法和 RLS 算法分别由文献 [343] 和 [352] 提出。此外，若 $r=1$，则 PAST 算法简化为以下算法。

算法 9.7.2 (子空间跟踪的压缩映射 (PASTd) 算法)[485]

选择初始化向量 $\boldsymbol{d}_i(0)$ 和 $\boldsymbol{w}_i(0)$

对 $t=1,2,\cdots$，计算

　$\boldsymbol{x}_1(t)=\boldsymbol{x}(t)$

　对 $i=1,2,\cdots,r$，计算

$$\begin{aligned}
y_i(t)&=\boldsymbol{w}_i^{\mathrm{H}}(t-1)\boldsymbol{x}_i(t)\\
d_i(t)&=\beta d_i(t-1)+|y_i(t)|^2\\
\boldsymbol{e}_i(t)&=\boldsymbol{x}_i(t)-\boldsymbol{w}_i(t-1)y_i(t)\\
\boldsymbol{w}_i(t)&=\boldsymbol{w}_i(t-1)+\boldsymbol{e}_i(t)[y_i^*(t)/d_i(t)]\\
\boldsymbol{x}_{i+1}(t)&=\boldsymbol{x}_i(t)-\boldsymbol{w}_i(t)y_i(t)
\end{aligned}$$

PASTd 算法又可进一步推广为秩和子空间二者同时跟踪的算法。对此推广感兴趣的读者可参考文献 [486]。

投影逼近子空间跟踪算法可以对 $\boldsymbol{W}-\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{Q}$ 进行跟踪。现在考虑信号子空间 $\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{H}}$ 的直接跟踪。由投影矩阵的关系式 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{H}}$ 知，信号子空间 $\boldsymbol{U}_r\boldsymbol{U}_r^{\mathrm{H}}$ 的跟踪等价于投影矩阵 $\boldsymbol{P}$ 的跟踪。使用投影矩阵代替式 (9.7.13) 的代价函数中的矩阵 $\boldsymbol{W}\boldsymbol{W}^{\mathrm{H}}$，即可将投影逼近子空间跟踪的代价函数等价写成

$$J(\boldsymbol{P})=\mathrm{E}\{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\|^2\}=\mathrm{tr}(\boldsymbol{C})-\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{P})-\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}})+\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}) \tag{9.7.26}$$

为了使 $\boldsymbol{P}$ 为投影矩阵，必须对它加幂等矩阵的约束条件 $\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{P}$ 和复共轭对称的约束条件 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{P}$。利用这些约束条件可以简化式 (9.7.26)。于是，便得到直接跟踪信号子空间投影矩阵的约束优化问题

$$\min J(\boldsymbol{P})=\min \mathrm{E}\{\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}\|^2\}=\min[\mathrm{tr}(\boldsymbol{C})-\mathrm{tr}(\boldsymbol{C}\boldsymbol{P})] \tag{9.7.27}$$

约束条件为 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{P})\neq n$，$\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{P}$。这一优化准则是 Utschick 提出的 [454]。约束条件 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{P})\neq n$ 意味着 $\boldsymbol{P}$ 不可以是非奇异的幂等矩阵 (即单位矩阵)。

9.8 快速子空间分解

本节将从另外一个角度观察 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解。这一观点的基本出发点是：样本协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的主特征向量的张成与 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的 Rayleigh-Ritz (RR) 向量的张成二者是 $\boldsymbol{A}$ 的信号子空间的渐近等价估计；而利用 Lanczos 算法, 又可将 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 变换为三对角矩阵 $\boldsymbol{T}_m$ (其特征值分解简单), 从而 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的 RR 向量可以由 $\boldsymbol{T}_m$ 的主特征向量与 Lanczos 基直接求出。换句话说, Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解可以利用 Lanczos 算法求出。本节要介绍的快速子空间分解就是基于 Lanczos 迭代的主 RR 向量估计算法，是 Xu 等人提出的 [482],[483]。

9.8.1 Rayleigh-Ritz 逼近

和前几节一样, 令 $\boldsymbol{A}\in C^{M\times M}$ 为协方差矩阵，它是 Hermitian 的。考虑样本协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的特征值和特征向量的所谓 Rayleigh-Ritz (RR) 逼近问题。为此, 先引入以下定义。

定义 9.8.1 对于一个 m 维子空间 S^m，若

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{y}_i^{(m)}-\theta_i^{(m)}\boldsymbol{y}_i^{(m)}\perp S^m \tag{9.8.1}$$

则分别称 $\theta_i^{(m)}$ 和 $\boldsymbol{y}_i^{(m)}$ 是 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 Rayleigh-Ritz (RR) 值和 RR 向量。

定义 9.8.2 Krylov 矩阵记作 $\boldsymbol{K}^m(A,f)$，定义为

$$\boldsymbol{K}^m(A,f)=[\boldsymbol{f},\ \boldsymbol{A}\boldsymbol{f},\cdots,\ \boldsymbol{A}^{m-1}\boldsymbol{f}] \tag{9.8.2}$$

并将其张成

$$\mathcal{K}^m(A,f)=\text{Span}\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{A}\boldsymbol{f},\cdots,\boldsymbol{A}^{m-1}\boldsymbol{f}\} \tag{9.8.3}$$

称作 Krylov 子空间。

对于 RR 值和 RR 向量, 文献 [356] 证明了以下结果。

引理 9.8.1 令 $(\theta_i^{(m)},\boldsymbol{y}_i^{(m)})\,(i=1,2,\cdots,m)$ 为子空间 S^m 的 RR 值和 RR 向量，且 $\boldsymbol{Q}=[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_m]$ 为同一子空间的正交基。如果 $(\alpha_i,\boldsymbol{s}_i)$ 是 $m\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{Q}^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{Q}$ 的第 i 个特征对 (特征值与特征向量)，其中，$i=1,2,\cdots,m$, 则

$$\theta_i^{(m)}=\alpha_i \tag{9.8.4}$$

$$\boldsymbol{y}_i^{(m)}=\boldsymbol{Q}\boldsymbol{s}_i \tag{9.8.5}$$

推论 9.8.1 令 $(\theta_i^{(m)},\boldsymbol{y}_i^{(m)})\,(i=1,2,\cdots,m)$ 为 Krylov 子空间 $\mathcal{K}^m(A,f)$ 的 RR 对 (RR 值和 RR 向量)。如果

$$\pi(x)=\prod_{i=1}^{m}(x-\theta_i^{(m)}),\qquad \prod_{i=1,i\neq k}^{m}(x-\theta_i^{(m)}),\qquad 1\leqslant k\leqslant m$$

则

$$\boldsymbol{y}_k^{(m)}=\pi_k(A)\boldsymbol{f}/\|\pi_k(A)\boldsymbol{f}\|$$

对引理 9.8.1 和推论 9.8.1 的证明感兴趣的读者可分别参阅文献 [356] 中的 11-4 节和 12-3 节。引理 9.8.1 表明，一个 Hermitian 矩阵的特征值和特征向量可以分别用 Krylov 子空间的 RR 值和 RR 向量逼近。这种逼近称为 Rayleigh-Ritz 逼近。

RR 值和 RR 向量与 Lanczos 算法密切相关。特别地，RR 值 $\{\theta_k^{(m)}\}$ 和 RR 向量 $\{\boldsymbol{y}_k^{(m)}\}$ 可以在 Lanczos 算法的第 m 步获得。Lanczos 算法分两种：实现 Hermitian 矩阵的三对角化的三 Lanczos 迭代和实现任意矩阵双对角化的双 Lanczos 迭代。

算法 9.8.1 (三 Lanczos 迭代算法) [184]

给定 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$；$\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{f}$ (单位范数向量)；$\beta_0=1$；$j=0$

while $(\beta_j\neq 0)$

  $\boldsymbol{q}_{j+1}=\boldsymbol{r}_j/\beta_j$;

  $j=j+1$;

  $\alpha_j=\boldsymbol{q}_j^{\rm H}\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_j$;

  $\boldsymbol{r}_j=\boldsymbol{A}\boldsymbol{q}_j-\alpha_j\boldsymbol{q}_j-\beta_{j-1}\boldsymbol{q}_{j-1}$;

  $\beta_j=\|\boldsymbol{r}_j\|_2$

end

在三 Lanczos 迭代的第 m 步 (即 $j=m$)，将得到 m 个正交向量 $\{\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_m\}$，它们组成 Krylov 子空间 $\mathcal{K}^m(A,f)=\text{Span}\{\boldsymbol{f},\boldsymbol{A}\boldsymbol{f},\cdots,\boldsymbol{A}^{m-1}\boldsymbol{f}\}$ 的一组正交基 $\boldsymbol{Q}_m$，常称之为 Lanczos 基。

令 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值分解为

$$\boldsymbol{A}=\sum_{k=1}^{M}\lambda_k \boldsymbol{e}_k \boldsymbol{e}_k^{\mathrm{H}} \tag{9.8.6}$$

其中，$(\lambda_k,\boldsymbol{e}_k)$ 为 $\boldsymbol{A}$ 的第 k 个特征值和特征向量，并假定 $\lambda_1>\cdots>\lambda_d>\lambda_{d+1}=\cdots=\lambda_M=\sigma$。即是说，$\{\lambda_k,\boldsymbol{e}_k\}_{k=1}^{d}$ 为信号特征值和信号特征向量。

RR 值和 RR 向量具有下列重要的渐近性质：对 $m>d$，它们各自的误差

$$\theta_k^{(m)}-\hat{\lambda}_k=O(N^{-m-d}),\qquad k=1,2,\cdots,d \tag{9.8.7}$$

$$\boldsymbol{y}_k^{(m)}-\hat{\boldsymbol{e}}_k=O(N^{-(m-d)/2}),\qquad k=1,2,\cdots,d \tag{9.8.8}$$

式中，N 为数据长度。因此，一旦 $m\geqslant d+2$，则有

$$\lim_{N\to\infty}\sqrt{N}(\boldsymbol{y}_k^{(m)}-\boldsymbol{e}_k)=\lim_{N\to\infty}\sqrt{N}(\hat{\boldsymbol{e}}_k-\boldsymbol{e}_k),\qquad k=1,2,\cdots,d \tag{9.8.9}$$

即 $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{y}_1^{(m)},\boldsymbol{y}_2^{(m)},\cdots,\boldsymbol{y}_d^{(m)}\}$ 和 $\mathrm{Span}\{\hat{\boldsymbol{e}}_1,\hat{\boldsymbol{e}}_2,\cdots,\hat{\boldsymbol{e}}_d\}$ 都是信号子空间 $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{e}_1,\boldsymbol{e}_2,\cdots,\boldsymbol{e}_d\}$ 的渐近等价的估计。因此，Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的信号子空间的求解便变成了 $\boldsymbol{A}$ 的 RR 特征向量的求解。

进一步地, Lanczos 基通过 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的三对角化，将 $\boldsymbol{A}$ 的 RR 对 (RR 值和 RR 向量) 与三对角矩阵的特征对 (特征值和特征向量) 紧密联系在一起。

令 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 是 Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的样本估计。

引理 9.8.2 对于样本协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 及其特征值 $\hat{\lambda}_k$，下列关系以概率 1 成立：

$$\hat{\boldsymbol{A}}-\boldsymbol{A}=O\left(\sqrt{\frac{1}{N}\log\log N}\right) \tag{9.8.10}$$

$$\hat{\lambda}_k-\lambda_k=O\left(\sqrt{\frac{1}{N}\log\log N}\right),\qquad k=1,2,\cdots,M \tag{9.8.11}$$

式中，N 为估计 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 所使用的数据长度。

式 (9.8.10) 的证明可在文献 [300] 中找到，而式 (9.8.11) 的证明见文献 [511]。

令 $\boldsymbol{Q}_m=[\boldsymbol{q}_1,\boldsymbol{q}_2,\cdots,\boldsymbol{q}_m]$ 是 Lanczos 基, 则由文献 [356] 知

$$\boldsymbol{Q}_m^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{Q}_m=\boldsymbol{T}_m=\begin{bmatrix}\alpha_1 & \beta_1 & & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & \ddots & \alpha_{m-1} & \beta_{m-1}\\ & & & \beta_{m-1} & \alpha_m\end{bmatrix} \tag{9.8.12}$$

其中，$\boldsymbol{T}_m$ 为 $m\times m$ 实三角矩阵。

由于 $\boldsymbol{Q}_m^{\mathrm{H}}\hat{\boldsymbol{A}}\boldsymbol{Q}_m=\boldsymbol{T}_m$，故 RR 值和 RR 向量可以根据 $m\times m$ 三对角矩阵 $\boldsymbol{T}_m$ 的特征值分解求出。于是，Krylov 子空间 $\mathcal{K}^m(\hat{A},f)$ 的 RR 值和 RR 向量可用来逼近样本协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的期望特征值和特征向量。这一过程称作 Rayleigh-Ritz 逼近, 简称 RR

逼近。Lanczos 算法最吸引人的性质就是：借助 Lanczos 基，可以把求原来 $M \times M$ (复值) 样本协方差 (Hermitian) 矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的期望特征值和特征向量这一较大的问题转变成计算 $m \times m$(实) 三对角矩阵的特征值分解的较小的问题，因为 m 通常比 M 小很多。

关于 RR 逼近，Xu 与 Kailath [483] 证明了下面的重要结果。

定理 9.8.1 令 $\hat{\lambda}_1 > \hat{\lambda}_2 > \cdots > \hat{\lambda}_M$ 和 $\hat{\boldsymbol{e}}_1, \hat{\boldsymbol{e}}_2, \cdots, \hat{\boldsymbol{e}}_M$ 分别是样本协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 的特征值和特征向量，其中，$\hat{\boldsymbol{A}}$ 是利用 N 个独立同正态分布 $N(0, \boldsymbol{A})$ 的数据向量计算得到的，且 $\boldsymbol{A}$ 是一个结构化的矩阵 (秩 d 矩阵 $+\sigma \boldsymbol{I}$)。令 $\lambda_1 > \cdots > \lambda_d > \lambda_{d+1} = \cdots = \lambda_M = \sigma$ 和 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \cdots, \boldsymbol{e}_M$ 分别是理想协方差矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值和特征向量。用 $\theta_1^{(m)} \geqslant \theta_2^{(m)} \geqslant \cdots \geqslant \theta_m^{(m)}$ 和 $\boldsymbol{y}_1^{(m)}, \boldsymbol{y}_2^{(m)}, \cdots, \boldsymbol{y}_m^{(m)}$ 分别表示从 Krylov 子空间 $\mathcal{K}^m(A, f)$ 获得的 RR 值和 RR 向量。若选择 $\boldsymbol{f}$ 满足 $\boldsymbol{f}^{\mathrm{H}} \hat{\boldsymbol{e}}_i \neq \boldsymbol{0} (1 \leqslant i \leqslant d)$, 则对于 $k = 1, 2, \cdots, d$, 下列结果成立：

(1) 若 $m \geqslant d+2$, 则 RR 值 $\theta_k^{(m)}$ 逼近它们对应的特征值 λ_k 的精度为 $O(N^{-(m-d)})$, 而 RR 向量 $\boldsymbol{y}_k^{(m)}$ 逼近它们对应的特征向量 $\hat{\boldsymbol{e}}_k$ 的精度为 $O(N^{(m-d)/2})$, 即

$$\theta_k^{(m)} = \hat{\lambda}_k + O(N^{-(m-d)}) \tag{9.8.13}$$

$$\boldsymbol{y}_k^{(m)} = \hat{\boldsymbol{e}}_k + O(N^{-(m-d)/2}) \tag{9.8.14}$$

(2) 若 $m \geqslant d+1$, 则 $\theta_k^{(m)}$ 和 $\hat{\lambda}_k$ 是特征值 λ_k 的渐近等价估计。如果 $m \geqslant d+2$, 则 $\boldsymbol{y}_k^{(m)}$ 和 $\hat{\boldsymbol{e}}_k$ 也是特征向量 $\boldsymbol{e}_k$ 的渐近等价估计。

9.8.2 基于三 Lanczos 迭代的快速子空间分解

定理 9.8.1 表明，从三 Lanczos 迭代的第 $m(\geqslant d+1)$ 步得到的 d 个比较大的 RR 值可以用来代替信号特征值。但是，还需要先估计 d。为此，构造检验统计量

$$\phi_{\hat{d}} = N(M - \hat{d}) \log \left[\frac{\sqrt{\dfrac{1}{M-\hat{d}} \left(\|\hat{\boldsymbol{A}}\|_{\mathrm{F}}^2 - \displaystyle\sum_{k=1}^{\hat{d}} \theta_k^{(m)^2} \right)}}{\dfrac{1}{M-\hat{d}} \left(\mathrm{tr}(\hat{\boldsymbol{A}}) - \displaystyle\sum_{k=1}^{\hat{d}} \theta_k^{(m)} \right)} \right] \tag{9.8.15}$$

其中

$$\mathrm{tr}(\hat{\boldsymbol{A}}) = \sum_{k=1}^{M} \hat{\lambda}_k \tag{9.8.16}$$

$$\|\hat{\boldsymbol{A}}\|_{\mathrm{F}}^2 = \sum_{k=1}^{M} \hat{\lambda}_k^2 \tag{9.8.17}$$

下面的定理给出了在 $H_0 : \hat{d} = d$ 假设下 $\phi_{\hat{d}}$ 的极限分布。

定理 9.8.2 [483] 对于 $m > d+1$，若 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 是实矩阵，则式 (9.8.15) 定义的统计量 $\phi_{\hat{d}}$ 在 $H_0 : \hat{d} = d$ 假设下为渐近 χ^2 分布，其自由度为 $\frac{1}{2}(M-d)(M-d+1)-1$，。当若 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 为复矩阵，则 $2\phi_{\hat{d}}$ 是自由度为 $(M-d)^2-1$ 的渐近 χ^2 分布。

根据以上分析, 可以归纳出下面的算法 [483]。

算法 9.8.2 (有效秩检测算法)

步骤 1 令 $\hat{d}=1$。

步骤 2 取假设 $H_0:\hat{d}=d$。

步骤 3 根据自由度 $\frac{1}{2}(M-\hat{d})(M-\hat{d}-1)-1$ (对实矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$) 或 $(M-\hat{d})^2-1$ (对复矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$) 的 χ^2 分布的拖尾大小, 适当选择阈门值 $\gamma_{\hat{d}}$。

步骤 4 利用式 (9.8.15) 计算检验统计量 $\phi_{\hat{d}}$。

步骤 5 如果 $\phi_{\hat{d}}\leqslant\gamma_{\hat{d}}c(N)$ (对实矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$) 或 $2\phi_{\hat{d}}\leqslant\gamma_{\hat{d}}c(N)$(对复矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$), 其中, $c(N)$ 是一个与数据长度有关的常数, 则接受 H_0 假设, 并停止。

步骤 6 如果 $\phi_{\hat{d}}>\gamma_{\hat{d}}c(N)$, 就拒绝 H_0 假设; 若 $\hat{d}<m-2$, 则取 $\hat{d}=\hat{d}+1$, 并返回步骤 2。否则, 就令 $m=m+1$, 继续下一步 Lanczos 迭代。

下面的定理给出了有效秩检测算法强一致性的条件.

定理 9.8.3 [483] 对于由式 (9.8.15) 定义的检验统计量 $\phi_{\hat{d}}$, 算法 9.8.2 确定的 $\hat{d}$ 为强一致估计, 若 $c(N)$ 满足下列条件:

$$\lim_{N\to\infty}\frac{c(N)}{N}=0,\qquad \lim_{N\to\infty}\frac{c(N)}{\log\log N}=\infty \tag{9.8.18}$$

一旦 d 确定之后, 就可计算式 (9.8.12) 中的三对角矩阵 $\boldsymbol{T}_m$ 的特征值 $\{\theta_k^{(m)}\}_{k=1}^m$ 和特征向量 $\{\boldsymbol{s}_k^{(m)}\}_{k=1}^m$, 并选出与 d 个最大特征值对应的 d 个主特征向量 $\{\boldsymbol{s}_k^{(m)}\}_{k=1}^d$。期望求出的特征向量 $\{\boldsymbol{y}_k^{(m)}\}_{k=1}^d$ 可以用 $\boldsymbol{y}_k^{(m)}=\boldsymbol{Q}_m\boldsymbol{s}_k^{(m)}$ 直接计算。

结合算法 9.8.2, 可以归纳出以下算法 [483]。

算法 9.8.3 (快速子空间分解算法)

步骤 1 适当选择 $\boldsymbol{r}_0=\boldsymbol{f}$, 它满足定理 9.8.1 中的条件。令 $m=1,\beta_0=\|\boldsymbol{r}_0\|=1$ 和 $\hat{d}=1$。

步骤 2 执行第 m 次三 Lanczos 迭代 (算法 9.8.1)。

步骤 3 计算 RR 值 $\theta_i^{(m)},i=1,2,\cdots,m$。

步骤 4 对 $\hat{d}=1,2,\cdots,m-1$ 计算检验统计量 $\phi_{\hat{d}}$。若 $\phi_{\hat{d}}\leqslant\gamma_{\hat{d}}c(N)$, 则令 $d=\hat{d}$ (接受 H_0 假设), 并转到步骤 5。否则, 令 $m=m+1$, 并返回步骤 2。

步骤 5 计算与 Krylov 子空间 $\mathcal{K}^m(\hat{A},f)$ 相关联的 d 个主 RR 向量 $y_k^{(m)}$。最后的信号子空间估计为 $\mathrm{Span}\{\boldsymbol{y}_1^{(m)},\boldsymbol{y}_2^{(m)},\cdots,\boldsymbol{y}_d^{(m)}\}$。

9.8.3 基于双 Lanczos 迭代的快速子空间分解

三 Lanczos 迭代仅适用于 Hermitian 矩阵的三角化, 不能够用于非正方的矩阵。由于样本协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 通常可写作

$$\hat{\boldsymbol{A}}=\frac{1}{N}\sum_{t=1}^{N}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(t)\boldsymbol{x}(t)=\frac{1}{N}\boldsymbol{X}_N^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X}_N \tag{9.8.19}$$

其中, $\boldsymbol{x}(t)=[x_1(t),x_2(t),\cdots,x_M(t)]$ 为行向量, 而 $\boldsymbol{X}_N=[\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(1),\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(2),\cdots,\boldsymbol{x}^{\mathrm{T}}(N)]^{\mathrm{T}}$ 为 $N\times M$ 数据矩阵。

算法 9.8.4 (双 Lanczos 迭代)[184]

给定 $\boldsymbol{X}_N; \boldsymbol{p}_0 = \boldsymbol{f}$ (单位范数向量); $\beta_0 = 1; \boldsymbol{u}_0 = \boldsymbol{0}; j = 0$

while $\beta_j^{(b)} \neq 0$

$\quad \boldsymbol{v}_{j+1} = \boldsymbol{p}_j / \beta_j^{(b)}$

$\quad j = j + 1;$

$\quad \boldsymbol{r}_j = \boldsymbol{X}_N \boldsymbol{v}_j - \beta_{j-1}^{(b)} \boldsymbol{u}_{j-1};$

$\quad \alpha_j^{(b)} = \|\boldsymbol{r}_j\|;$

$\quad \boldsymbol{u}_j = \boldsymbol{r}_j / \alpha_j^{(b)};$

$\quad \boldsymbol{p}_j = \boldsymbol{X}_N^{\mathrm{H}} \boldsymbol{u}_j - \alpha_j^{(b)} \boldsymbol{v};$

$\quad \beta_j^{(b)} = \|\boldsymbol{p}_j\|;$

end

类似于三 Lanczos 迭代，双 Lanczos 迭代给出左 Lanczos 基 $\boldsymbol{U}_j = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_j]$，右 Lanczos 基 $\boldsymbol{V}_j = [\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \cdots, \boldsymbol{v}_j]$ 以及双对角矩阵 $\boldsymbol{B}_j$：

$$\boldsymbol{B}_j = \begin{bmatrix} \alpha_1^{(b)} & \beta_1^{(b)} & & \\ & \alpha_2^{(b)} & \ddots & \\ & & \ddots & \beta_{j-1}^{(b)} \\ & & & \alpha_j^{(b)} \end{bmatrix} \tag{9.8.20}$$

下面的定理表明，对矩形的数据矩阵 $\boldsymbol{X}_N$ 使用双 Lanczos 迭代等价于对样本协方差矩阵 $\hat{\boldsymbol{A}}$ 使用三 Lanczos 迭代.

定理 9.8.4 [482] 考查任一 $N \times M$ 矩阵 $\boldsymbol{X}_N$。对 $\boldsymbol{X}_N^{\mathrm{H}} \boldsymbol{X}_N$ 应用三 Lanczos 迭代，并对 $\boldsymbol{X}_N$ 使用双 Lanczos 迭代。如果两个算法使用相同的初始值，即如果 $\boldsymbol{q}_1 = \boldsymbol{v}_1$，则

(1) $\boldsymbol{Q}_j = \boldsymbol{V}_j, \quad j = 1, 2, \cdots, M$

(2) $\boldsymbol{T}_j = \boldsymbol{B}_j^{\mathrm{H}} \boldsymbol{B}_j, \quad j = 1, 2, \cdots, M$

根据上述定理描述的等价性，只要将算法 9.8.3 中的三 Lanczos 迭代换成双 Lanczos 迭代，即可得到基于双 Lanczos 迭代的快速子空间分解算法。

本章小结

本章从子空间的代数关系和几何关系入手，介绍了子空间的分析理论与方法：

(1) 矩阵基本子空间 (行空间、列空间和零空间) 的性质与构造方法；

(2) 信号子空间分析方法和噪声子空间分析方法。

为了适应实时信号处理的需要，本章还专门讨论了子空间的实时跟踪与更新的方法：

(1) 基于扰动理论的子空间跟踪；

(2) 修正特征值分解及其递推更新；

(3) 基于优化理论的子空间跟踪；

(4) 快速子空间分解。

特别地，围绕基于优化理论的子空间跟踪，重点介绍了 Grassmann 流形、Sticfel 流形和投影逼近子空间跟踪等典型方法。

习 题

9.1 令 V 是所有 2×2 矩阵的向量空间，证明子空间

$$W=\left\{\boldsymbol{A}:\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}a & b\\ c & d\end{bmatrix},\quad ad=0, bc=0\right\}$$

不是 V 的子空间。

9.2 令 W 是所有 3×3 斜对称矩阵的集合。证明 W 是所有 3×3 矩阵的向量空间 V 的一个子空间，并求其张成子空间的基。

9.3 令 V 是 2×2 矩阵的向量空间，并且

$$W=\left\{\boldsymbol{A}:\boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}a & 0\\ 0 & b\end{bmatrix},\quad a,b\,\text{为任意实数}\right\}$$

是 V 的一个子空间。若

$$\boldsymbol{B}_1=\begin{bmatrix}0 & 2\\ 1 & 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}_2=\begin{bmatrix}0 & 3\\ 0 & 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{B}_3=\begin{bmatrix}0 & 3\\ 2 & 0\end{bmatrix}$$

(1) 证明矩阵集合 $\{\boldsymbol{B}_1,\boldsymbol{B}_2,\boldsymbol{B}_3\}$ 线性相关，并将 $\boldsymbol{B}_3$ 表示为 $\boldsymbol{B}_1$ 和 $\boldsymbol{B}_2$ 的线性组合；

(2) 证明 $\{\boldsymbol{B}_1,\boldsymbol{B}_2\}$ 是一个线性无关的矩阵集合。

9.4 令 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p$ 是有限维的非零向量空间 V 的向量，并且 $S=\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p\}$ 为一向量集合。判断下列结果的真与假：

(1) $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p$ 的所有线性组合的集合为一向量空间；

(2) 若 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_{p-1}\}$ 线性无关，则 S 也是线性无关的向量集合；

(3) 若向量集合 S 线性无关，则 S 是向量空间 V 的一组基；

(4) 若 $V=\text{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p\}$，则 S 的某个子集是 V 的一组基；

(5) 若 $\dim(V)=p$ 和 $V=\text{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_p\}$，则向量集合 S 不可能线性相关。

9.5 判断下列结果是否为真：

(1) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间与 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的列空间相同。

(2) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间和列空间的维数相同，即使 $\boldsymbol{A}$ 不是正方矩阵。

(3) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间和零空间的维数之和等于 $\boldsymbol{A}$ 的行数。

(4) 矩阵 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$ 的行空间与 $\boldsymbol{A}$ 的列空间相同。

9.6 令 $\boldsymbol{A}$ 为 $m\times n$ 矩阵，在子空间 $\text{Row}(\boldsymbol{A})$, $\text{Col}(\boldsymbol{A})$, $\text{Null}(\boldsymbol{A})$, $\text{Row}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$, $\text{Col}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}})$ 内，有几个不同的子空间？哪些位于 R^m 空间，哪些位于 R^n 空间？

9.7 证明下列向量集合 W 为向量子空间，或举反例说明它不是向量子空间：

(1) $W=\left\{\begin{bmatrix}a\\b\\c\\d\end{bmatrix}: \begin{matrix}2a+b=c\\ a+b+c=d\end{matrix}\right\}$；　(2) $W=\left\{\begin{bmatrix}a-b\\3b\\3a-2b\\a\end{bmatrix}: a,b \text{为实数}\right\}$

(3) $W=\left\{\begin{bmatrix}2a+3b\\c+a-2b\\4c+a\\3c-a \quad b\end{bmatrix}: a,b,c \text{为实数}\right\}$

9.8 已知

$$A=\begin{bmatrix}8&2&9\\-3&-2&-4\\5&0&5\end{bmatrix},\qquad w=\begin{bmatrix}2\\1\\-2\end{bmatrix}$$

判断 w 是在列空间 $\mathrm{Col}(A)$ 还是零空间 $\mathrm{Null}(A)$？

9.9 在统计理论中常常要求矩阵是满秩的。若矩阵 A 是一个 $m\times n$ 矩阵，其中，$m>n$，试解释 A 满秩的条件是其列线性无关。

9.10 一个 7×10 矩阵能否有二维的零空间？

9.11 试证明 v 在矩阵 A 的列空间 $\mathrm{Col}(A)$ 内，若 $Av=\lambda v$，且 $\lambda\neq 0$。

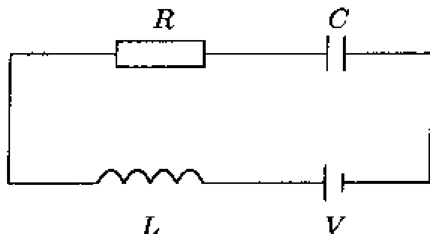
9.12 令 V_1 和 V_2 的列向量分别是 C^n 的同一子空间的正交基，证明 $V_1V_1^{\mathrm{H}}x=V_2V_2^{\mathrm{H}}x, \forall x$。

9.13 令 V 是一子空间，且 S 是 V 的生成元或张成集合。已知

$$S=\left\{\begin{bmatrix}1\\0\\-1\end{bmatrix},\begin{bmatrix}-1\\-2\\-3\end{bmatrix},\begin{bmatrix}1\\1\\2\end{bmatrix},\begin{bmatrix}2\\-1\\0\end{bmatrix}\right\}$$

求 V 的基，并计算 $\dim(V)$。

9.14 题 9.14图中的电路由电阻 R (欧姆)、电感 L (亨利) 和电容 C (法拉) 和初始电压源 V 组成。令 $b=R/(2L)$，并假定 R,L,C 的值使得 b 的数值也等于 $1/\sqrt{LC}$ (例如，伏特计就是这种情况)。令 $v(t)$ 是在时间 t 测得的电容两端的瞬时电压，而 H 是将 $v(t)$ 映射为 $Lv''(t)+Rv'(t)+(1/C)v(t)$ 的线性变换的零空间。可以证明，v 位于零空间 H 内，并且 H 由所有具有形式 $v(t)=\mathrm{e}^{-bt}(c_1+c_2t)$ 的函数组成。求零空间 H 的一组基。



题 9.14图　电路图

9.15 一质量为 m 的物体挂在一弹簧的末端。如果压紧该弹簧，然后再释放，这一

质量 - 弹簧系统就会开始振荡。假定质量 m 与其静止位置的位移 $y(t)$ 由函数

$$y(t) = c_1 \cos(\omega t) + c_2 \sin(\omega t)$$

描述，其中，ω 是一个与质量 m 和弹簧有关的常数。固定 ω，令 c_1 和 c_2 任意。

(1) 证明：描述质量 - 弹簧系统振荡的函数 $y(t)$ 的集合为一向量空间 V。

(2) 求向量空间 V 的一组基。

9.16 令

$$W = \left\{ \begin{bmatrix} a \\ b \\ c \end{bmatrix} : a - 3b - c = 0 \right\}$$

证明 W 是 R^3 的一个子空间。

9.17 已知矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & 3 \\ 2 & 4 \\ 5 & 7 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 2 & -7 \\ 5 & -1 \end{bmatrix}$$

求列空间 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})$ 和 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{B})$ 之间的主角的余弦。

9.18 令 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是两个 $m \times n$ 矩阵，并且 $m \geqslant n$。证明

$$\min_{\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{I}_n} \|\boldsymbol{A} - \boldsymbol{B}\boldsymbol{Q}\|_{\mathrm{F}}^2 = \sum_{i=1}^{n} [(\sigma_i^2(\boldsymbol{A}))^2 - 2\sigma_i(\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{A}) + (\sigma_i(\boldsymbol{B}))^2]$$

式中，$\sigma_i(\boldsymbol{A})$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的第 i 个奇异值。

9.19 假定 T 是一个一对一线性变换，并且 $T(\boldsymbol{u}) = T(\boldsymbol{v})$ 总是意味着 $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{v}$。证明：若像的集合 $\{T(\boldsymbol{u}_1), T(\boldsymbol{u}_2), \cdots, T(\boldsymbol{u}_p)\}$ 线性相关，则向量集合 $\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_p\}$ 线性相关。(注：该命题表明，一个一对一线性变换将线性无关的向量集合映射为线性无关的向量集合。)

9.20 已知矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 2 & 5 & -8 & 0 & 17 \\ 1 & 3 & -5 & 1 & 5 \\ -3 & -11 & 19 & -7 & -1 \\ 1 & 7 & -13 & 5 & -3 \end{bmatrix}$$

试求其列空间、行空间和零空间的基。

9.21 已知

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} -2 & 1 & -1 & 6 & -8 \\ 1 & -2 & -4 & 3 & -2 \\ 7 & -8 & -10 & -3 & 10 \\ 4 & -5 & -7 & 0 & 4 \end{bmatrix} \quad 和 \quad \boldsymbol{B} = \begin{bmatrix} 1 & -2 & -4 & 3 & -2 \\ 0 & 3 & 9 & -12 & 12 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

是两个行等价的矩阵，试求

(1) 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩和零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A})$ 的维数；

(2) 列空间 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})$ 和行空间 $\mathrm{Row}(\boldsymbol{A})$ 的基；

(3) 如果希望求零空间 Null(A) 的基，下一步应该执行什么运算？

(4) 在 A^{T} 的行阶梯型中有几个主元列？

9.22 [397] 令 P 是一投影算子，并且 $U = [u_1, u_2, \cdots, u_m]$ 的列向量组成值域 Range(P) 的一组基。试解释为什么总是存在 Null$(P)^{\perp}$ 的一组基 $V = [v_1, v_2, \cdots, v_m]$，使得 $u_i^{\mathrm{H}} v_j = 0$？满足这一正交关系的矩阵 U 和 V 称为双正交的。令 S 和 H 是两个子空间，它们具有相同维数 m。是否总是存在双正交的 U 和 V，使得 U 的列向量组成子空间 S 的一组基，而 V 的列向量是 H 的一组基？

9.23 令 A 是一个 $n \times n$ 对称矩阵，证明：

(1) $(\mathrm{Col}A)^{\perp} = \mathrm{Null}(A)$。

(2) R^n 内的每一个向量 x 都可以写作 $x = \hat{x} + z$，式中，$\hat{x} \in \mathrm{Col}(A)$，$z \in \mathrm{Null}(A)$。

9.24 考虑一码分多址 (CDMA) 系统，它共有 K 个用户。假定用户 1 为期望用户，其特征波形向量 s_1 为已知，并满足单位能量条件 $\langle s_1, s_1 \rangle = s_1^{\mathrm{T}} s_1 = 1$。现有一接收机的观测数据向量为 $y(n)$，它包含了 K 个用户信号的线性混合。为了检测期望用户的信号，希望设计一多用户检测器 c_1，使检测器的输出能量最小化。若多用户检测器服从约束条件 $c_1 = s_1 + U_i w$，其中，U_i 称为干扰子空间，意即它的列张成干扰子空间。求干扰子空间 U_i。

第10章 投影分析

在无线通信、雷达、时间序列分析和信号处理等领域中，许多问题的最优求解都可归结为：提取某个所希望的信号，而抑制掉其他所有干扰、杂波或者噪声。投影是解决这类问题的一个极为重要的数学工具。

投影分为正交投影和斜投影两类。当两个子空间正交时，常采用正交投影进行参数的最优估计或者信号的最优滤波，因为观测数据向量在被投影的子空间上的分量可以被抽取，而且理论上还可以完全对消掉观测数据向量在另外一个子空间的分量。正交投影已成为最小二乘参数估计 [184]、阵列信号处理 [64]、自适应滤波 [12] 中的有力工具。然而，若两个子空间不正交，则正交投影不再有效，必须使用斜投影，才能达到抽取观测数据向量在一个子空间上的分量，而完全抑制它在另外一个子空间上的分量之目的。

本章系统地介绍向量与矩阵的投影分析。首先，将给出投影与正交投影的基本知识。然后，将分别从数学和信号处理的角度，引出投影矩阵与正交投影矩阵的定义公式。接着，将围绕投影矩阵与正交投影矩阵的应用，展开多方面的讨论。特别地，将介绍投影矩阵与正交投影矩阵的递推计算，以及这种递推计算在自适应滤波器设计中的应用。最后，将聚焦于斜投影矩阵及其有趣的典型应用。

10.1 投影与正交投影

在学习力学的过程中，我们已经熟悉图 10.1.1 所示一方块物体在斜面上重力的分解。

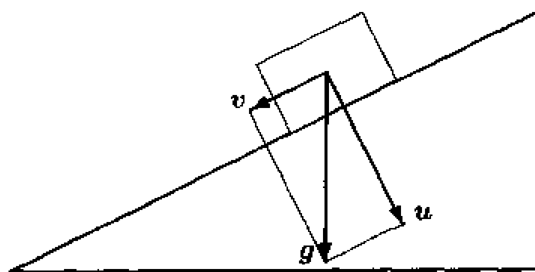


图 10.1.1 物体重力的分解

图 10.1.1 中，物体的重力 $\boldsymbol{g}$ 垂直向下，它可以分解为两个分量：一个与斜面垂直，为物体的压力 $\boldsymbol{u}$；另一个与斜面平行，为物体的下滑力，即有 $\boldsymbol{g}=\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}$。由于压力 $\boldsymbol{u}$ 与下

滑力 $\boldsymbol{v}$ 相互垂直，所以重力的分解 $\boldsymbol{g}=\boldsymbol{u}+\boldsymbol{v}$ 属于所谓的正交分解。

如果定义斜面的法线 (下指) 向量为 $\boldsymbol{w}$，则压力 $\boldsymbol{u}$ 可视为重力 $\boldsymbol{g}$ 在 $\boldsymbol{w}$ 上的投影，表示为

$$\boldsymbol{u}=\mathrm{Proj}_{\boldsymbol{w}}\boldsymbol{g}$$

而与压力 $\boldsymbol{u}$ 垂直的下滑力 $\boldsymbol{v}$ 即是重力 $\boldsymbol{g}$ 在 $\boldsymbol{w}$ 上的正交投影，记作

$$\boldsymbol{v}=\mathrm{Proj}_{\boldsymbol{w}}^{\perp}\boldsymbol{g}$$

10.1.1 投影定理

更一般地，我们来考虑向量子空间中的投影与正交投影。

众所周知，在初等几何中，一个点到一直线的最短距离为垂直距离。推而广之，从一个点到一子空间的最短距离是与该子空间正交的距离。如果 $\boldsymbol{x}\in H$，而 M 是向量空间 H 的一个子空间，并且 $\boldsymbol{x}$ 不在子空间 M 内，那么最短距离问题就是求向量 $\boldsymbol{y}\in M$ 使得向量 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$ 的长度最短。如果 $\hat{\boldsymbol{x}}\in M$ 使得范数 $\|\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}\|$ 最小，则 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 称为向量 $\boldsymbol{x}$ 在子空间 M 上的投影。

令 M 是 H 的一个子空间。若已知 V 中的向量 $\boldsymbol{x}$，现希望求向量 $\hat{\boldsymbol{x}}\in M$ 使得

$$\|\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}\|\leqslant\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|,\quad\forall\boldsymbol{y}\in M \tag{10.1.1}$$

子空间 M 中满足不等式 (10.1.1) 的向量 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 称为向量 $\boldsymbol{x}$ 在子空间 M 上的投影或向量 $\boldsymbol{x}$ 的最优二乘逼近。直观上，向量 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 是子空间 M 中与 $\boldsymbol{x}$ 距离最近的向量。

显然，上述问题的求解过程本质上与最小二乘问题等价。需要注意的是，若 M 是 H 的一个无穷维的子空间，那么向量 $\boldsymbol{x}$ 到子空间 M 的投影就有可能不存在。但是，如果 M 是有限维的子空间，向量 $\boldsymbol{x}$ 到该子空间的投影就一定存在，并且唯一。

定理 10.1.1 (投影定理) 令 H 是向量空间，而 M 是 H 内的 n 维子空间。若对于 H 中的向量 $\boldsymbol{x}$，在子空间 M 内有一个向量 $\hat{\boldsymbol{x}}$，使得 $\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}$ 与 M 中的每一个向量 $\boldsymbol{y}$ 都满足正交条件，即

$$\langle\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{y}\rangle=0 \tag{10.1.2}$$

则不等式 $\|\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}\|\leqslant\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$ 对于所有向量 $\boldsymbol{y}\in M$ 成立，并且等号仅当 $\boldsymbol{y}=\hat{\boldsymbol{x}}$ 时成立。

证明 计算向量范数的平方，直接得

$$\begin{aligned}\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2&=\|(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})+(\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{y})\|^2\\&=(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})+2(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}(\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{y})+(\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{y})^{\mathrm{T}}(\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{y})\end{aligned} \tag{1}$$

由于 $(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=\langle\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{y}\rangle=0$ 对于每一个向量 $\boldsymbol{y}\in M$ 均成立，故对于 M 中的向量 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 自然也成立。于是，有

$$(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}(\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{y})=(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}\hat{\boldsymbol{x}}-(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y}=0$$

将这一结果代入式 (1)，立即有 $\|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|^2=\|\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}\|^2+\|\hat{\boldsymbol{x}}-\boldsymbol{y}\|^2\geqslant\|\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}\|^2$，等号仅当 $\boldsymbol{y}=\hat{\boldsymbol{x}}$ 成立。 ■

定理 10.1.1 表明，当 M 是有限维的子空间时，向量 $\boldsymbol{x}$ 到该子空间的投影 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 唯一存在。类似地，向量 $\boldsymbol{x}$ 到子空间 M 的正交补 $M^{\perp}$ 上的投影则称为正交投影。

$\boldsymbol{x}$ 到子空间 M 上的投影 $\hat{\boldsymbol{x}}$ 常用数学符号缩写为

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x},\quad \hat{\boldsymbol{x}}\in M \tag{10.1.3}$$

其中，$\boldsymbol{P}_M$ 代表到闭子空间 M 上的投影映射，习惯称为投影算子。如图 10.1.2 所示，$(\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}})$ 是从 $\boldsymbol{x}$ 到 M 的垂直线。

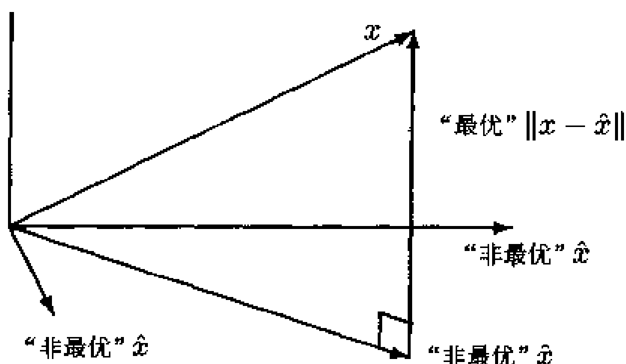


图 10.1.2 投影定理的几何解释

给定一个向量空间 H，一个子空间 M 和一个元素 $\boldsymbol{x}\in H$，定理 10.1.1 表明，M 内与 $\boldsymbol{x}$ 最接近的元素 (即 $\hat{\boldsymbol{x}}\in M$) 是唯一的，它满足方程

$$\langle\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}},\boldsymbol{y}\rangle=0,\quad \forall\,\boldsymbol{y}\in M \tag{10.1.4}$$

式 (10.1.4) 给出了 $\boldsymbol{x}$ 在子空间 M 内的最佳 (均方) 预测子 $\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x}$ 应该满足的方程，称之为预测方程。

令 $M^{\perp}$ 表示子空间 M 的正交补。投影 $\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x}$ 具有以下性质 [62]：

(1) $\boldsymbol{P}_M(\alpha\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{y})=\alpha\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x}+\beta\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{y},\quad \boldsymbol{x},\boldsymbol{y}\in H;\quad \alpha,\beta\in C$。

(2) $\|\boldsymbol{x}\|^2=\|\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x}\|^2+\|(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_M)\boldsymbol{x}\|^2$。

(3) 每一个 $\boldsymbol{x}\in M$ 都具有以下的唯一表示：

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_M)\boldsymbol{x}\quad (\text{正交分解}) \tag{10.1.5}$$

即 $\boldsymbol{x}$ 可以唯一分解成 M 的元素与 $M^{\perp}$ 的元素之和。

(4) $\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x}_n\to\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x}$，若 $\|\boldsymbol{x}_n-\boldsymbol{x}\|\to 0$。

(5) $\boldsymbol{x}\in M$ 当且仅当 $\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}$。

(6) $\boldsymbol{x}\in M^{\perp}$ 当且仅当 $\boldsymbol{P}_M\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$。

(7) $M_1\subseteq M_2$，当且仅当 $\boldsymbol{P}_{M_1}\boldsymbol{P}_{M_2}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}_{M_1}\boldsymbol{x}$ 对所有 $\boldsymbol{x}\in H$ 恒成立。

10.1.2 均方估计

一个集合 $M \subseteq L_2$ 称为正交随机变量系，若对每个 $\boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta} \in M(\boldsymbol{\xi} \neq \boldsymbol{\eta})$ 均有 $\boldsymbol{\xi} \perp \boldsymbol{\eta}$。特别地，若对每一个 $\boldsymbol{\xi} \in M$ 均有 $\|\boldsymbol{\xi}\| = 1$，则称 M 是一标准正交系。

许多工程问题都可以归结为：给定 n 个数据向量 $\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n$，希望找出 n 个常数 $a_1, a_2, \cdots, a_n$，使得用线性组合 $\hat{\boldsymbol{\xi}} = \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\eta}_i$ 拟合未知的随机变量 $\boldsymbol{\xi}$ 时，拟合 (或估计) 误差向量

$$\epsilon = \boldsymbol{\xi} - \hat{\boldsymbol{\xi}} = \boldsymbol{\xi} - \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\eta}_i \tag{10.1.6}$$

的均方值

$$P = \mathrm{E}\left\{\left|\boldsymbol{\xi} - \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\eta}_i\right|^2\right\} \tag{10.1.7}$$

为最小。在参数估计理论中，称这样的估计值为 $\boldsymbol{\xi}$ 的最佳线性均方估计 [317],[520]。

定理 10.1.2 (L_2 空间的投影定理) 若数据向量 $\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n$ 组成标准正交系，则随机变量 $\boldsymbol{\xi}$ 的最佳均方估计由

$$\hat{\boldsymbol{\xi}} = \sum_{i=1}^{n} \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle \boldsymbol{\eta}_i \tag{10.1.8}$$

确定。

证明 注意到 $M = \{\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n\}$ 是一标准正交系，故

$$\left\langle \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\eta}_i, \sum_{j=1}^{n} a_j \boldsymbol{\eta}_j \right\rangle = \sum_{i=1}^{n} a_i^2$$

另一方面，$a_i^2 - 2a_i\langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle = |a_i - \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle|^2 - |\langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle|^2$。利用这两个结果及式 (10.1.6)，即得

$$\begin{aligned}
P &= \mathrm{E}\left(\boldsymbol{\xi} - \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\eta}_i\right)^2 = \left\|\boldsymbol{\xi} - \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\eta}_i\right\|^2 \\
&= \left\langle \boldsymbol{\xi} - \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\eta}_i,\ \boldsymbol{\xi} - \sum_{j=1}^{n} a_j \boldsymbol{\eta}_j \right\rangle \\
&= \|\boldsymbol{\xi}\|^2 - 2\sum_{i=1}^{n} a_i \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle + \left\langle \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\eta}_i,\ \sum_{j=1}^{n} a_j \boldsymbol{\eta}_j \right\rangle \\
&= \|\boldsymbol{\xi}\|^2 - 2\sum_{i=1}^{n} a_i \langle \boldsymbol{\xi},\ \eta_i \rangle + \sum_{i=1}^{n} a_i^2 \\
&= \|\boldsymbol{\xi}\|^2 - \sum_{i=1}^{n} |a_i - \langle \boldsymbol{\xi},\ \boldsymbol{\eta}_i \rangle|^2 + \sum_{i=1}^{n} |\langle \boldsymbol{\xi},\ \boldsymbol{\eta}_i \rangle|^2 \\
&\geqslant \|\boldsymbol{\xi}\|^2 + \sum_{i=1}^{n} |\langle \boldsymbol{\xi},\ \boldsymbol{\eta}_i \rangle|^2
\end{aligned}$$

等号成立的条件是 $a_i = \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle$，即 $\sum_{i=1}^{n} |a_i - \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle|^2 = 0$。就是说，当 $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ 取式 (10.1.8) 的形式时 P 为最小。这就证明了 $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ 是 $\boldsymbol{\xi}$ 的最佳均方估计。■

定义 10.1.1 (线性流形) 令 M 是 H 空间的子空间，L 代表 M 内的有限个元素的所有线性组合的全体，即 $L = \left\{ \boldsymbol{\xi} : \boldsymbol{\xi} = \sum_{i=1}^{n} a_i \boldsymbol{\eta}_i,\ \boldsymbol{\eta}_i \in M \right\}$，称 L 是由 M 张成的线性流形。

下面解释最佳线性均方估计 (10.1.8) 式的几何意义。考虑以下分解：

$$\boldsymbol{\xi} = \hat{\boldsymbol{\xi}} + (\boldsymbol{\xi} - \hat{\boldsymbol{\xi}}) \tag{10.1.9}$$

可以证明，上述分解就是正交分解，即 $\hat{\boldsymbol{\xi}} \perp (\boldsymbol{\xi} - \hat{\boldsymbol{\xi}})$。为此，只要等价证明 $\mathrm{E}\{\hat{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi} - \hat{\boldsymbol{\xi}})\} = 0$ 即可。证明是简单的，因为

$$\begin{aligned}
\mathrm{E}\{\hat{\boldsymbol{\xi}}(\boldsymbol{\xi} - \hat{\boldsymbol{\xi}})\} &= \mathrm{E}\left\{ \left[\sum_{j=1}^{n} \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_j \rangle \boldsymbol{\eta}_j \right] \left[\boldsymbol{\xi} - \sum_{i=1}^{n} \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle \boldsymbol{\eta}_i \right] \right\} \\
&= \mathrm{E}\left\{ \boldsymbol{\xi} \sum_{j=1}^{n} \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_j \rangle \boldsymbol{\eta}_j \right\} - \mathrm{E}\left\{ \sum_{i=1}^{n} \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle \boldsymbol{\eta}_i \sum_{j=1}^{n} \langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_j \rangle \boldsymbol{\eta}_j \right\} \\
&= \sum_{j=1}^{n} [\mathrm{E}\{\langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_j \rangle\}]^2 - \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{n} \mathrm{E}\{\langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle\} \mathrm{E}\{\langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_j \rangle\} \mathrm{E}\{\langle \boldsymbol{\eta}_i, \boldsymbol{\eta}_j \rangle\} \\
&= \sum_{j=1}^{n} [\mathrm{E}\{\langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_j \rangle\}]^2 - \sum_{i=1}^{n} [\mathrm{E}\{\langle \boldsymbol{\xi}, \boldsymbol{\eta}_i \rangle\}]^2 \\
&= 0
\end{aligned}$$

在得到倒数第二式时，利用了 $\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n$ 的标准正交假设 $\mathrm{E}\{\langle \boldsymbol{\eta}_i, \boldsymbol{\eta}_j \rangle\} = \delta_{ij}$，其中，$\delta_{ij}$ 为 Kronecker δ 函数。

图 10.1.3 画出了式 (10.1.9) 的正交分解，其中，$\boldsymbol{i}_1$ 和 $\boldsymbol{i}_2$ 分别为长度为 1 的向量。

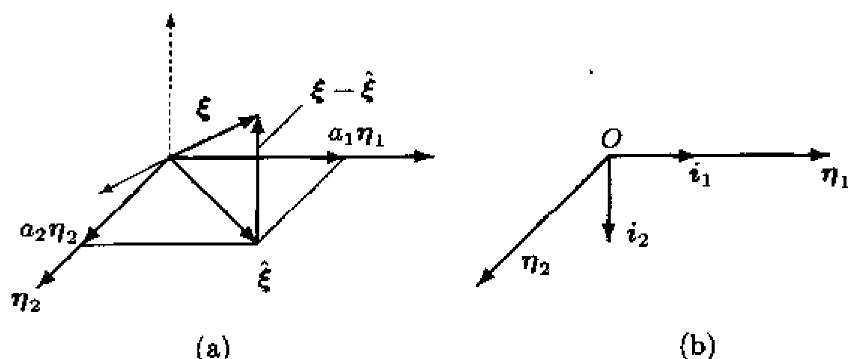


图 10.1.3 正交分解

很自然地，称 $\boldsymbol{\xi} - \hat{\boldsymbol{\xi}}$ 垂直于线性流形 L，并称 $\hat{\boldsymbol{\xi}}$ 是 $\boldsymbol{\xi}$ 在线性流形 L 上的投影。因此，常用投影 $\mathrm{Proj}\{\boldsymbol{\xi} | \boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n\}$ 表示已知数据向量 $\boldsymbol{\eta}_1, \boldsymbol{\eta}_2, \cdots, \boldsymbol{\eta}_n$ 情况下未知参数向量

$\boldsymbol{\xi}$ 的均方估计。这就是为什么把定理 10.1.2 称为 L_2 空间的投影定理的缘故。

此外，有时也使用符号 $\hat{\mathrm{E}}\{\boldsymbol{\xi}|\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n\}$ 表示由已知数据向量 $\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n$ 求得的 $\boldsymbol{\xi}$ 均方估计。

L_2 空间的投影定理提供了求最佳线性均方估计的方法，但要求所给定的全部数据 $\boldsymbol{\eta}_1,\boldsymbol{\eta}_2,\cdots,\boldsymbol{\eta}_n$ 是标准正交的。在已知数据向量不正交的一般情况下, 应该利用预白化, 将原来非正交的数据向量先白化成具有零均值和单位方差的标准白噪声 (它们是标准正交的)。然后, 对白化之后的数据向量使用投影定理求均方估计。

在某些情况下, 可以很容易求得向量 $\boldsymbol{x}$ 到子空间 M 的投影。

定理 10.1.3 [240] 令 H 是一内积空间，$\boldsymbol{x}$ 是 H 中的一个向量。若 M 是 H 中的 n 维子空间，并且 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n\}$ 是子空间 M 的一组正交基向量，则

$$\|\boldsymbol{x}-\hat{\boldsymbol{x}}\| \leqslant \|\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}\|$$

当且仅当

$$\hat{\boldsymbol{x}} = \frac{\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{u}_1\rangle}{\langle \boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_1\rangle}\boldsymbol{u}_1 + \frac{\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{u}_2\rangle}{\langle \boldsymbol{u}_2,\boldsymbol{u}_2\rangle}\boldsymbol{u}_2 + \cdots + \frac{\langle \boldsymbol{x},\boldsymbol{u}_n\rangle}{\langle \boldsymbol{u}_n,\boldsymbol{u}_n\rangle}\boldsymbol{u}_n \tag{10.1.10}$$

这一定理的意义在于：当 M 是内积空间 H 的有限维子空间时，可以先求出子空间 M 的一组正交基向量 $\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n\}$ (例如使用 Gram-Schmidt 正交化方法)；然后，再根据式 (10.1.10) 计算向量 $\boldsymbol{x}$ 在子空间 M 上的投影 $\hat{\boldsymbol{x}}$。

不过, 在一般情况下, 一个向量到某个子空间的投影并不能简单求得。尤其是在实时信号处理中, 感兴趣的向量往往是随时间变化的, 它到某个子空间的投影也是随时间变化的。下面各节将对投影和正交投影作更深入的分析。

10.2 投影矩阵与正交投影矩阵

在上一节的讨论中，只是简单地提及了投影算子这一术语。本节对投影算子展开专门分析。由于投影算子与幂等矩阵密切相关，先讨论幂等矩阵。

10.2.1 幂等矩阵

任何一个满足幂等关系 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$ 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为幂等矩阵。容易验证，单位矩阵也是幂等矩阵，但在以后的讨论中，假定幂等矩阵不取单位矩阵的形式，除非另有申明。

幂等矩阵具有以下有用性质 [411]。

(1) 幂等矩阵的特征值只取 1 和 0 两个数值。

(2) 所有的幂等矩阵 (单位矩阵除外) $\boldsymbol{A}$ 都是奇异矩阵。

(3) 所有幂等矩阵的秩与迹相等，即 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A})=\mathrm{tr}(\boldsymbol{A})$。

(4) 若 $\boldsymbol{A}$ 为幂等矩阵，则 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$ 也为幂等矩阵，即有 $\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$。

(5) 若 $\boldsymbol{A}$ 为幂等矩阵，则 $\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A}$ 也是幂等矩阵，且 $\text{rank}(\boldsymbol{I}_n - \boldsymbol{A}) = n - \text{rank}(\boldsymbol{A})$。

(6) 所有对称的幂等矩阵 (单位矩阵除外) 都是半正定的。

(7) 令 $n \times n$ 幂等矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 r_A，则 $\boldsymbol{A}$ 有 r_A 个特征值 1 和 $n - r_A$ 个特征值 0。

(8) 所有的幂等矩阵 $\boldsymbol{A}$ 都是可对角化的：

$$\boldsymbol{U}^{-1}\boldsymbol{A}\boldsymbol{U} = \boldsymbol{\Sigma} = \begin{bmatrix} \boldsymbol{I}_{r_A} & \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} \end{bmatrix} \tag{10.2.1}$$

式中，$r_A = \text{rank}(\boldsymbol{A})$。

(9) 一个对称的幂等矩阵 $\boldsymbol{A}$ 可以表示为 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{L}\boldsymbol{L}^{\text{T}}$，其中，$\boldsymbol{L}$ 满足 $\boldsymbol{L}^{\text{T}}\boldsymbol{L} = \boldsymbol{I}_{R_A}$。

证明 下面给出性质 (1) ~ 性质 (4) 的证明。

(1) 根据矩阵特征值的定义与性质知 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}$ 和 $\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{u} = \lambda^2\boldsymbol{u}$。因此，对于幂等矩阵 $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{A}$，有 $\lambda^2\boldsymbol{u} = \lambda\boldsymbol{u}, \forall \boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}$。这说明，若 $(\lambda, \boldsymbol{u})$ 是投影算子的特征对，则 $(\lambda^2, \boldsymbol{u})$ 也一定是投影算子的特征对，即投影算子的特征值具有“幂等性” $\lambda = \lambda^2$，其解为 $\lambda = 1$ 或 $\lambda = 0$，即投影算子 $\boldsymbol{P}$ 的特征值只取 1 和 0 这两个值。

(2) 求幂等矩阵 $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{A}$ 的行列式，有 $|\boldsymbol{A}^2| = |\boldsymbol{A}|$，即 $|\boldsymbol{A}|^2 = |\boldsymbol{A}|$，故 $|\boldsymbol{A}| = 1$ 或 $|\boldsymbol{A}| = 0$。因此，除单位矩阵以外，所有其他的幂等矩阵的行列式都等于零，即所有其他幂等矩阵都是奇异的。

(3) 对于任何一个矩阵而言，它的秩等于非零特征值的个数。由于幂等矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值只取 1 和 0 两个值，故幂等矩阵的秩等于特征值 1 的个数。又由 $n \times n$ 矩阵的迹与特征值的关系式

$$\text{tr}(\boldsymbol{A}) = \sum_{i=1}^{n} \lambda_i = \lambda_1 + \lambda_2 + \cdots + \lambda_n$$

易知，幂等矩阵的迹等于特征值 1 之和 (即特征值 1 的个数)。因此，幂等矩阵的秩与迹相等。

(4) 当 $\boldsymbol{A}$ 为幂等矩阵时，易知

$$\boldsymbol{A}^{\text{H}}\boldsymbol{A}^{\text{H}} = (\boldsymbol{A}\boldsymbol{A})^{\text{H}} = \boldsymbol{A}^{\text{H}}$$

即 $\boldsymbol{A}^{\text{H}}$ 也是幂等矩阵。 ■

虽然幂等矩阵的特征值只取 0 和 1，但是特征值只取 0 和 1 的矩阵却不一定是幂等矩阵。例如，

$$\boldsymbol{B} = \frac{1}{8}\begin{bmatrix} 11 & 3 & 3 \\ 1 & 1 & 1 \\ -12 & -4 & -4 \end{bmatrix}$$

有三个特征值 1，0 和 0，但它不是幂等矩阵，因为

$$\boldsymbol{B}^2 = \frac{1}{8}\begin{bmatrix} 11 & 3 & 3 \\ 0 & 0 & 0 \\ -11 & -3 & -3 \end{bmatrix} \neq \boldsymbol{B}$$

与幂等矩阵的定义相类似，满足 $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{O}$ (零矩阵) 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 称为幂零矩阵 (nilpotent matrix)，而满足 $\boldsymbol{A}^2 = \boldsymbol{I}$ (单位矩阵) 的矩阵 $\boldsymbol{A}$ 则称为幂 1 矩阵 (unipotent matrix) [411]。

矩阵 $\boldsymbol{A}_{n\times n}$ 称为三幂矩阵 (tripotent matrix)，若 $\boldsymbol{A}^3=\boldsymbol{A}$。

容易看出，若 $\boldsymbol{A}$ 为三幂矩阵，则 $-\boldsymbol{A}$ 也是三幂矩阵。

需要注意的是，一个三幂矩阵不一定是幂等矩阵，虽然一个幂等矩阵肯定是三幂矩阵 (因为若 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{A}$，则 $\boldsymbol{A}^3=\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}=\boldsymbol{A}$)。为了证明这一点，我们来考察三幂矩阵的特征值。

令 λ 是三幂矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的特征值，并且 $\boldsymbol{u}$ 是与之对应的特征向量，即有

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{u}$$

两边左乘矩阵 $\boldsymbol{A}$，则有

$$\boldsymbol{A}^2\boldsymbol{u}=\lambda\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda^2\boldsymbol{u}$$

再用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 左乘上式两边，立即有

$$\boldsymbol{A}^3\boldsymbol{u}=\lambda^2\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda^3\boldsymbol{u}$$

由于 $\boldsymbol{A}^3=\boldsymbol{A}$ 为三幂矩阵，上式又可写作 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{u}=\lambda^3\boldsymbol{u}$，故三幂矩阵的特征值满足关系式 $\lambda=\lambda^3$，即三幂矩阵的特征值有 $-1,0,+1$ 三种取值的可能，这与幂等矩阵的特征值只取 0 和 $+1$ 两种值不同。从这个意义上讲，幂等矩阵是没有特征值为 -1 的特殊三幂矩阵。

10.2.2 从数学角度看投影矩阵

考虑向量空间 C^n 的直和分解 $C^n=S\oplus H$。

定义 10.2.1 [383] 考虑向量空间 $C^n=S\oplus H$ 内的任意向量 $\boldsymbol{x}\in C^n$。若 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{x}_2$ 满足 $\boldsymbol{x}_1\in S$ 和 $\boldsymbol{x}_2\in H$，并且 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 是唯一确定的，则称映射 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1$ 是向量 $\boldsymbol{x}$ 沿着子空间 H 的方向，到子空间 S 的投影，并称 $\boldsymbol{P}$ 是沿着 H 的方向，到 S 的投影算子 (projector onto S along H)，常简记为 $\boldsymbol{P}_{S|H}$。

根据定义易知，投影算子 $\boldsymbol{P}$ 是线性齐次算子，并且在 $\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$ 的情况下，满足 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{x}_2$ 的 $\boldsymbol{x}_2$ 由 $\boldsymbol{x}_2=\boldsymbol{x}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x}$ 唯一确定。因此，利用投影算子，复向量空间 C^n 的任何一个向量 $\boldsymbol{x}$ 都可以唯一分解为

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x} \tag{10.2.2}$$

这表明，若 $\boldsymbol{P}$ 是沿着子空间 H 到子空间 S 的投影算子，则 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})$ 就是沿着子空间 S 到子空间 H 的投影算子。

定理 10.2.1 线性齐次算子 $\boldsymbol{P}$ 是投影算子，当且仅当 $\boldsymbol{P}$ 是幂等矩阵，即

$$\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{P} \tag{10.2.3}$$

证明 令 $\boldsymbol{P}$ 是沿着子空间 H 的方向，到子空间 S 上的投影算子。容易看出，若 $\boldsymbol{u}\in S$，则 $\boldsymbol{u}$ 沿着 H 的方向到 S 的投影就是向量 $\boldsymbol{u}$ 本身，即 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{u}=\boldsymbol{u}$。因此，有

$$\boldsymbol{P}^2\boldsymbol{u}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}\boldsymbol{u}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{u}\quad\forall\,\boldsymbol{u}\in S$$

从而得 $\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{P}$，即必要性得证。

下面证明充分性。为此，令 $\boldsymbol{P}$ 是幂等线性齐次算子，即 $\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{P}$。于是有

$$\begin{aligned}
&\boldsymbol{Px}=\boldsymbol{P}^2\boldsymbol{x},\quad \forall\, \boldsymbol{x}\in C^n\\
&\quad\Rightarrow \boldsymbol{Px}=\boldsymbol{P}^2\boldsymbol{x}+\boldsymbol{P}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x},\quad \forall\, \boldsymbol{x}\in C^n\\
&\quad\Rightarrow \boldsymbol{Px}=\boldsymbol{P}[\boldsymbol{P}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})]\boldsymbol{x},\quad \forall\, \boldsymbol{x}\in C^n\\
&\quad\Rightarrow \boldsymbol{x}=\boldsymbol{Px}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x},\quad \forall\, \boldsymbol{x}\in C^n
\end{aligned}$$

满足式 (10.2.2)，表明 $\boldsymbol{P}$ 是投影算子。 ■

从上述定理，很自然地可以引出投影算子的定义。

定义 10.2.2 齐次线性算子 $\boldsymbol{P}$ 称为投影算子，若它具有幂等性，即 $\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{PP}=\boldsymbol{P}$。

由矩阵值域的定义知，满足 $\boldsymbol{x}_1=\boldsymbol{Px}$ 的所有向量 $\boldsymbol{x}_1$ 的集合定义投影算子 $\boldsymbol{P}$ 的值域，即子空间 $S=\text{Range}(\boldsymbol{P})$。类似地，满足 $\boldsymbol{x}_2=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x}$ 的所有向量 $\boldsymbol{x}_2$ 的集合定义投影算子 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})$ 的值域，即子空间 $H=\text{Range}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})$。

根据子空间直和的定义，式 (10.2.2) 所示的向量的唯一分解可以等价写作子空间的直和形式：

$$C^n=S\oplus H=\text{Range}(\boldsymbol{P})\oplus\text{Range}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}) \tag{10.2.4}$$

即子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{P})$ 和 $\text{Range}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})$ 无交连，或者 $\text{Range}(\boldsymbol{P})\cap\text{Range}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})=\boldsymbol{0}$。

另一方面，子空间 $\text{Null}(\boldsymbol{P})$ 与 $\text{Range}(\boldsymbol{P})$ 唯一的共同元素为零向量，即 $\text{Null}(\boldsymbol{P})\cap\text{Range}(\boldsymbol{P})=\{\boldsymbol{0}\}$。这是因为如果一个向量 $\boldsymbol{x}\in\text{Range}(\boldsymbol{P})$，则 $\boldsymbol{Px}=\boldsymbol{x}$；而且若 $\boldsymbol{x}$ 还在零空间 $\text{Null}(\boldsymbol{P})$ 内，则 $\boldsymbol{Px}=\boldsymbol{0}$。从而得 $\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}$。换言之，子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{P})$ 和 $\text{Null}(\boldsymbol{P})$ 共有的向量为零向量。由 $\text{Range}(\boldsymbol{P})\cap\text{Range}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})=\{0\}$ 及 $\text{Range}(\boldsymbol{P})\cap\text{Null}(\boldsymbol{P})=\{\boldsymbol{0}\}$ 知 $\text{Range}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})=\text{Null}(\boldsymbol{P})$。于是，式 (10.2.4) 可以改写为

$$C^n=S\oplus H=\text{Range}(\boldsymbol{P})\oplus\text{Null}(\boldsymbol{P}) \tag{10.2.5}$$

反之，每一对构成 C^n 的直和的子空间 S 和 H 定义唯一的投影算子 $\boldsymbol{P}$，其值域 $\text{Range}(\boldsymbol{P})$ 为一子空间，其零空间或核 $\text{Null}(\boldsymbol{P})$ 为另一空间，即有 $S=\text{Range}(\boldsymbol{P}),H=\text{Null}(\boldsymbol{P})$。而且，投影算子 $\boldsymbol{P}$ 是一线性映射，它通过唯一的分解

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{x}_1+\boldsymbol{x}_2=\boldsymbol{Px}+(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x} \tag{10.2.6}$$

将 C^n 的任意一个向量 $\boldsymbol{x}$ 映射为 S 子空间的分量 $\boldsymbol{x}_1$ 和 H 子空间的分量 $\boldsymbol{x}_2$。事实上，这样一种对应关系是唯一的：投影算子由它的值域和零空间唯一决定，而其值域和零空间构成复向量空间 C^n 的直和。

需要强调指出的是，在式 (10.2.6) 的唯一分解中，并不能保证 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 相互正交。然而，在很多实际应用中，常要求复向量空间 C^n 的任一向量 $\boldsymbol{x}$ 在两个子空间的投影 $\boldsymbol{x}_1$ 和 $\boldsymbol{x}_2$ 正交。这样一种特别重要的特殊情况要求零空间 H 是值域 S 的正交补，即

$$\text{Null}(\boldsymbol{P})=\text{Range}(\boldsymbol{P})^{\perp}$$

称复向量空间 C^n 的分解 $C^n = S \oplus H$ 为正交分解，若子空间 H 是 S 的正交补，即 $H = S^{\perp}$。换言之，子空间 H 内的任意向量 $\boldsymbol{v}$ 与子空间 S 内的任意向量 $\boldsymbol{u}$ 恒正交，即有 $\langle \boldsymbol{u}, \boldsymbol{v} \rangle = 0, \forall\, \boldsymbol{u} \in S, \boldsymbol{v} \in H$。因此，复向量空间的正交分解为

$$C^n = \text{Range}(\boldsymbol{P}) \oplus \text{Range}(\boldsymbol{P})^{\perp} \tag{10.2.7}$$

式中，$\text{Range}(\boldsymbol{P})^{\perp}$ 是 $\text{Range}(\boldsymbol{P})$ 的正交补。

定义 10.2.3 沿着正交补 $S^{\perp}$ 的方向，到子空间 S 的投影算子 $\boldsymbol{P}_{S|S^{\perp}}$ 称为正交投影算子 (orthogonal projector)。

下面的定理给出了正交投影算子的充分必要条件。

定理 10.2.2 [383] 齐次线性算子 $\boldsymbol{P}$ 是正交投影算子，当且仅当下列两个条件都满足：

(1) 线性算子是幂等算子，即 $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$。

(2) 线性算子具有 Hermitian 性 (复共轭对称性)，即 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}$。

证明 充分必要条件 (1) 已包含在定理 10.2.1 中，因此只需要证明充分必要条件 (2) 即可。观察知，对于复向量空间 C^n 内的任意向量 $\boldsymbol{x}$ 而言，如果 $\boldsymbol{P}$ 是一正交投影算子，则式 (10.2.2) 中两个投影分量之间的内积应该等于零，即有

$$\begin{aligned}
\langle \boldsymbol{Px}, (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x} \rangle = 0 \quad \forall \boldsymbol{x} \in C^n \\
&\Rightarrow \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x} \rangle = 0 \quad \forall \boldsymbol{x} \in C^n \\
&\Rightarrow \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}) = \boldsymbol{O} \\
&\Rightarrow \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P} \\
&\Rightarrow \boldsymbol{PP} = \boldsymbol{P} = (\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}})^{\mathrm{H}} = (\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P} \\
&\Rightarrow \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}
\end{aligned}$$

即必要性得证。下面证明充分性。若 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}$，并注意到 $\boldsymbol{P}$ 为幂等算子，则

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P} &\Rightarrow \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P} \\
&\Rightarrow \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}) = \boldsymbol{O} \\
&\Rightarrow \langle \boldsymbol{x}, \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x} \rangle = 0 \quad \forall \boldsymbol{x} \in C^n \\
&\Rightarrow \langle \boldsymbol{Px}, (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x} \rangle = 0 \quad \forall \boldsymbol{x} \in C^n
\end{aligned}$$

即 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Px} + (\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})\boldsymbol{x}$ 为正交分解，从而 $\boldsymbol{P}$ 是一正交投影算子。充分性得证。 ■

由定理 10.2.2，可以很自然地引出正交投影算子的定义。

定义 10.2.4 齐次线性算子 $\boldsymbol{P}$ 称为正交投影算子，若它是幂等算子和 Hermitian 算子，即同时满足 $\boldsymbol{P}^2 = \boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}$。

如果具体强调齐次线性算子 $\boldsymbol{P}$ 是到子空间 S 的正交投影算子，则必须增加一个条件：子空间 S 是线性算子 $\boldsymbol{P}$ 的值域或列空间，即 $\text{Range}(\boldsymbol{P}) = S$。否则，$\boldsymbol{P}$ 可能是到其他子空间的正交投影。

根据定理 10.2.2 和定义 10.2.3 易知，若 $\boldsymbol{P}$ 是一正交投影算子，则 $\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}$ 也是一正交投影算子。理由如下：首先 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})$ 是幂等算子，因为

$$(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})^2=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})=\boldsymbol{I}-2\boldsymbol{P}+\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}$$

式中，使用了 $\boldsymbol{P}$ 是投影算子的假设，即它具有幂等性 $\boldsymbol{P}^2=\boldsymbol{P}$。其次，$(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})$ 是 $\boldsymbol{P}$ 的正交补，因为

$$(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}-\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}=\boldsymbol{O}$$

式中，$\boldsymbol{O}$ 为零矩阵。

现在讨论投影算子经过某些运算后，仍然能够保持为投影算子的条件 [360],[516]。

定理 10.2.3 若 $\boldsymbol{E}_1$ 和 $\boldsymbol{E}_2$ 均为正交投影算子，则 $\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2$ 为正交投影算子，当且仅当

$$\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2=\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1=\boldsymbol{O} \tag{10.2.8}$$

即 $\boldsymbol{E}_1$ 和 $\boldsymbol{E}_2$ 无交叉项。

证明 充分性。当 $\boldsymbol{E}_1$ 和 $\boldsymbol{E}_2$ 均为幂等算子，并且满足式 (10.2.8) 时，易知

$$(\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2)^2=\boldsymbol{E}_1^2+\boldsymbol{E}_2^2=\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2$$

另外若 $\boldsymbol{E}_1$ 和 $\boldsymbol{E}_2$ 为投影算子，则它们分别具有 Hermitian 性，从而有

$$(\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2)^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{E}_1^{\mathrm{H}}+\boldsymbol{E}_2^{\mathrm{H}}=\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2$$

即 $\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2$ 也具有 Hermitian 性能。因此，$\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2$ 为正交投影算子。

必要性。由 $(\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2)^2=\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2$ 立即有

$$\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2+\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1=\boldsymbol{O} \tag{1}$$

上式分别左乘和右乘 $\boldsymbol{E}_1$，并利用 $\boldsymbol{E}_1^2=\boldsymbol{E}_1$，立即得

$$\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2+\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1=\boldsymbol{O},\quad \boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1+\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1=\boldsymbol{O}$$

两式相减，则 $\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2=\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1$。将这些结果代入式 (1), 立即得到式 (10.2.8)。 ■

定理 10.2.4 若 $\boldsymbol{E}_1$ 和 $\boldsymbol{E}_2$ 均为正交投影算子，则 $\boldsymbol{E}_1-\boldsymbol{E}_2$ 为正交投影算子，当且仅当

$$\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2=\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1=\boldsymbol{E}_2 \tag{10.2.9}$$

证明 $\boldsymbol{E}_1-\boldsymbol{E}_2$ 为正交投影算子，当且仅当 $\boldsymbol{I}-(\boldsymbol{E}_1-\boldsymbol{E}_2)$ 是正交投影算子。由于 $\boldsymbol{I}-(\boldsymbol{E}_1-\boldsymbol{E}_2)=(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{E}_1)-\boldsymbol{E}_2$，故 $\boldsymbol{E}_1-\boldsymbol{E}_2$ 为正交投影算子，当且仅当 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{E}_1)+\boldsymbol{E}_2$ 是正交投影算子。据定理 10.2.3 知，$(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{E}_1)+\boldsymbol{E}_2$ 是正交投影算子，当且仅当

$$(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{E}_1)\boldsymbol{E}_2=\boldsymbol{E}_2(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{E}_1)=\boldsymbol{O}$$

上式即是式 (10.2.9) 的等价表示。 ■

定理 10.2.5 若 $\boldsymbol{E}_1$ 和 $\boldsymbol{E}_2$ 为正交投影算子，并且

$$\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2 = \boldsymbol{E}_2\boldsymbol{E}_1 \tag{10.2.10}$$

则 $\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{E}_2$ 是正交投影算子。

由于投影算子 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P})$ 与 $\boldsymbol{P}$ 都是正交投影算子，而且它们相互正交，为便于区别，常将 $\boldsymbol{P}$ 称为投影矩阵，而它的正交补 $\boldsymbol{P}^{\perp}=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}$ 则称为正交投影矩阵。

下面讨论投影矩阵的构造方法。

为方便计，令 $m\times m$ 投影矩阵 $\boldsymbol{P}$ 有 r 个特征值为 1，另外 $m-r$ 个特征值为 0。于是，投影矩阵可以写作

$$\boldsymbol{P}=\sum_{i=1}^{m}\lambda_i\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}=\sum_{i=1}^{r}\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}} \tag{10.2.11}$$

考查任意一个 $m\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 的投影 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$，则

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{r}\boldsymbol{u}_i\boldsymbol{u}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{r}(\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i)^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i \tag{10.2.12}$$

式 (10.2.12) 揭示了投影矩阵的本质作用：

(1) 向量 $\boldsymbol{x}$ 经过投影矩阵 $\boldsymbol{P}$ 投影后，向量 $\boldsymbol{x}$ 与投影矩阵中具有特征值 1 的特征向量相关的部分 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i\,(i=1,2,\cdots,r)$ 在投影结果 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$ 中被完整保留。

(2) 向量 $\boldsymbol{x}$ 与投影矩阵中具有特征值 0 的特征向量相关的部分 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i\,(i=r+1,r+2,\cdots,m)$ 被投影矩阵全部对消，不出现在投影结果 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$ 中。

因此，当矩阵 $\boldsymbol{P}$ 是只具有特征值 0 和 1 的幂等矩阵时，变换结果 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$ 是向量 $\boldsymbol{x}$ 在 $\boldsymbol{P}$ 那些具有特征值 1 的特征向量上的投影 $(\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i)^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}_i\,(i=1,2,\cdots,r)$ 之叠加。“投影矩阵”由此而得名。

10.2.3 从信号处理角度看投影矩阵

现在，我们从信号处理的角度讨论投影矩阵。

如图 10.2.1 所示，将离散时间的滤波器视作一个投影算符或算子，不妨令其为 $\boldsymbol{P}$。设滤波器在离散时间 n 的输入向量为

$$\boldsymbol{x}(n)=[x(1),x(2),\cdots,x(n)]^{\mathrm{T}} \tag{10.2.13}$$

它是信号向量 $\boldsymbol{s}(n)$ 与加性白噪声 $\boldsymbol{v}(n)$ 的混合，即 $\boldsymbol{x}(n)=\boldsymbol{s}(n)+\boldsymbol{v}(n)$。

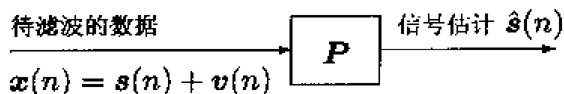


图 10.2.1 滤波器的投影算子表示

我们希望含噪声的数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 通过滤波器 $\boldsymbol{P}$ 后，得到滤波后的数据向量即信号向量的估计 $\hat{\boldsymbol{s}}(n) = \boldsymbol{P}\boldsymbol{x}(n)$。下面分析对滤波器算子 $\boldsymbol{P}$ 应该有哪些基本要求？为简便计，省略向量 $\boldsymbol{s}(n)$ 和 $\boldsymbol{x}(n)$ 等中的时间变量，将它们分别简记为 $\boldsymbol{s}$ 和 $\boldsymbol{x}$。

(1) 为了保证信号通过滤波器后不致发生“畸变”，投影算子 $\boldsymbol{P}$ 必须是一线性算子。

(2) 当滤波器输出 $\hat{\boldsymbol{s}}(n)$ 再次通过滤波器时，信号估计 $\hat{\boldsymbol{s}}(n)$ 不应发生任何变化。这意味着 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{P}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{x} = \hat{\boldsymbol{s}}$ 必须得到满足。这一条件等价为

$$\boldsymbol{P}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \boldsymbol{P}\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P} \tag{10.2.14}$$

即是说，投影算子 $\boldsymbol{P}$ 必须是一个幂等算子。

(3) 由于信号估计为 $\hat{\boldsymbol{s}} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$，因此 $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$ 代表滤波器的估计误差。根据正交性原理的引理，当滤波器工作在最优条件时，估计误差 $\boldsymbol{x} - \boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$ 应该与期望响应的估计值 $\boldsymbol{P}\boldsymbol{x}$ 正交，即

$$[\boldsymbol{x} - \boldsymbol{P}\boldsymbol{x}] \perp \boldsymbol{P}\boldsymbol{x} \tag{10.2.15}$$

或用向量的内积形式等价写作

$$\langle (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{x}, \boldsymbol{P}\boldsymbol{x} \rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}})\boldsymbol{P}\boldsymbol{x} = 0$$

上式应该对任意含白噪声的数据向量 $\boldsymbol{x}$ 恒成立，故有 $\boldsymbol{P} - \boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P} = 0$。容易验证，这一关系成立的充分必要条件是

$$\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P} \tag{10.2.16}$$

即投影算子应具有复共轭对称性或者 Hermitian 性。

总结以上讨论，作为滤波器的投影算子必须是一个线性算子，并且具有幂等性和复共轭对称性。

如前所述，当我们提及正交投影时，一般应该强调它是到哪一个子空间上的正交投影。因此，到同一个矩阵的列空间和行空间的正交投影是不相同的。下面两小节分别讨论这两种情况。

10.2.4 到列空间的投影矩阵与正交投影矩阵

令 $m \times n$ 维矩阵 $\boldsymbol{A}$ 是一个列满秩矩阵，即 $\mathrm{rank}(\boldsymbol{A}) = n$。记矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间 $\mathcal{C}(A) = \mathrm{Col}(\boldsymbol{A}) = \mathrm{Range}(\boldsymbol{A})$。一个自然会问的问题是：如何构造到列空间 $\mathcal{C}(A)$ 的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{\mathcal{C}(A)}$？

由于矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的秩为 n，只有 n 个非零奇异值 $\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n$，故 $\boldsymbol{A}$ 的奇异值分解

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = [\boldsymbol{U}_1, \boldsymbol{U}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{\Sigma}_1 \\ \boldsymbol{O}_{(m-n)\times n}\end{bmatrix}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}} \tag{10.2.17}$$

的对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}_1 = \mathrm{diag}(\sigma_1, \sigma_2, \cdots, \sigma_n)$，并且

$$\boldsymbol{U}_1 = [\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2, \cdots, \boldsymbol{u}_n], \quad \boldsymbol{U}_2 = [\boldsymbol{u}_{n+1}, \boldsymbol{u}_{n+2}, \cdots, \boldsymbol{u}_m] \tag{10.2.18}$$

分别是与 n 个非零奇异值和 $m - n$ 个零奇异值对应的奇异向量矩阵。

在第 9 章，我们曾经得到关于列空间的两个重要结果：

(1) 与非零奇异值对应的 n 个左奇异向量 $\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n$ 是列空间 $\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})$ 的标准正交基，即有

$$\mathrm{Col}(\boldsymbol{A})=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_1,\boldsymbol{u}_2,\cdots,\boldsymbol{u}_n\}=\mathrm{Span}(\boldsymbol{U}_1) \tag{10.2.19}$$

(2) 与零奇异值对应的 $m-n$ 个左奇异向量 $\boldsymbol{u}_{n+1},\boldsymbol{u}_{n+2},\cdots,\boldsymbol{u}_m$ 是零空间 $\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})$ 的标准正交基，即

$$\mathrm{Null}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}})=(\mathrm{Col}\,\boldsymbol{A})^{\perp}=\mathrm{Span}\{\boldsymbol{u}_{n+1},\boldsymbol{u}_{n+2},\cdots,\boldsymbol{u}_m\}=\mathrm{Span}(\boldsymbol{U}_2) \tag{10.2.20}$$

用矩阵 $\boldsymbol{A}$ 对 $n\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 作线性变换，得到 $m\times 1$ 向量 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$，则向量 $\boldsymbol{y}$ 可以表示为

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}=\sum_{i=1}^{n}\sigma_i\boldsymbol{u}_i(\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x})=\sum_{i=1}^{n}(\sigma_i\alpha_i)\boldsymbol{u}_i \tag{10.2.21}$$

式中，$\alpha_i=\boldsymbol{v}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$ 是特征向量 $\boldsymbol{v}$ 与向量 $\boldsymbol{x}$ 的内积。式 (10.2.21) 表明，线性变换结果 $\boldsymbol{y}=\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ 是矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的左奇异向量的线性组合。

$m\times n$ 线性变换 $\boldsymbol{A}$ 的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{A}}$ 将所有 $m\times 1$ 向量 $\boldsymbol{x}$ 投影到由线性变换 $\boldsymbol{A}$ 定义的子空间。投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{A}}$ 与线性变换 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的特征向量：n 个特征向量具有非零的特征值，其他 $m-n$ 个特征向量与特征值 0 相对应。由于投影矩阵只有特征值 1 和 0，因此投影矩阵的 n 个特征向量与特征值 1 对应，其他 $m-n$ 个特征向量与特征值 0 对应。换言之，投影矩阵的特征值分解具有以下形式：

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{A}}&=[\boldsymbol{U}_1,\boldsymbol{U}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_n & \boldsymbol{O}_{n\times(m-n)}\\ \boldsymbol{O}_{(m-n)\times n} & \boldsymbol{O}_{(m-n)\times(m-n)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{U}_2^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\\ &=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\end{aligned} \tag{10.2.22}$$

另一方面，由式 (10.2.17) 可求得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}\langle\boldsymbol{A},\boldsymbol{A}\rangle^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}&=\boldsymbol{A}(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\\ &=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\\ &=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}_1^2\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\\ &=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}_1^{-2}\boldsymbol{V}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{V}\boldsymbol{\Sigma}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\\ &=\boldsymbol{U}_1\boldsymbol{U}_1^{\mathrm{H}}\end{aligned} \tag{10.2.23}$$

比较式 (10.2.22) 和式 (10.2.23)，立即得到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{A}}$ 的定义式：

$$\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{A}\langle\boldsymbol{A},\boldsymbol{A}\rangle^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \tag{10.2.24}$$

那么，如何构造具有线性、幂等性和对称性的投影算子或投影矩阵呢？下面的定理给出了问题的答案。

定理 10.2.6 若 $M\times N$ $(M\geqslant N)$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 满列秩，则投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{A}}$ 由式 (10.2.24) 给出。

证明 投影矩阵 $\boldsymbol{P}_A$ 应满足两个基本要求。第一个要求是对于任意向量 $\boldsymbol{x} \in H^M$，$\boldsymbol{P}_A\boldsymbol{x}$ 都应该位于 $\boldsymbol{A}$ 的列空间。这意味着 $\boldsymbol{P}_A$ 必然具有 $\boldsymbol{P}_A = \boldsymbol{AG}$ 的形式，其中，$N \times M$ 矩阵 $\boldsymbol{G}$ 具有满行秩，若 $\boldsymbol{A}$ 具有满列秩的话。第二个要求是：若将 $\boldsymbol{P}_A\boldsymbol{x}$ 当作期望信号的估计值，则根据正交性原理的引理，下面的正交条件必须满足：

$$\langle \boldsymbol{P}_A\boldsymbol{x}, \boldsymbol{x} - \boldsymbol{P}_A\boldsymbol{x}\rangle = \boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_A^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_A)\boldsymbol{x} = 0$$

由于它应该对任意向量 $\boldsymbol{x}$ 都满足，所以上式可等价表示为

$$\boldsymbol{P}_A^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}_A^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_A \tag{10.2.25}$$

将 $\boldsymbol{P}_A = \boldsymbol{AG}$ 代入上式，则有

$$\boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{G}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AG} \tag{10.2.26}$$

下面证明式 (10.2.26) 与

$$\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{AG} \tag{10.2.27}$$

等价。很显然，式 (10.2.27) 一定意味着式 (10.2.26)。由于 $\boldsymbol{G}$ 具有满行秩，故 $\boldsymbol{GG}^H$ 是非奇异的，因此可以用 $(\boldsymbol{GG}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{G}$ 左乘式 (10.2.26)，其结果为式 (10.2.27)，即式 (10.2.26) 意味着式 (10.2.27)。由式 (10.2.27) 立即得

$$\boldsymbol{G} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$$

将上式代入 $\boldsymbol{P}_A = \boldsymbol{AG}$，便得到 $\boldsymbol{P}_A = \boldsymbol{A}\langle\boldsymbol{A}, \boldsymbol{A}\rangle^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}$，此即式 (10.2.24)。 ■

上述证明中，部分参考了文献 [239]。

容易验证，由式 (10.2.24) 定义的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_A$ 具有以下性质：

(1) 幂等性

$$\boldsymbol{P}_A\boldsymbol{P}_A = \boldsymbol{P}_A \tag{10.2.28}$$

(2) 对称性

$$\boldsymbol{P}_A^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}_A \tag{10.2.29}$$

10.2.5 正交投影矩阵

有了投影矩阵后，又可定义新的矩阵

$$\boldsymbol{P}_A^{\perp} = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_A = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{A}\langle\boldsymbol{A}, \boldsymbol{A}\rangle^{-1}\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} \tag{10.2.30}$$

由此定义式易知 $\boldsymbol{P}_A^{\perp}$ 具有以下性质：

(1) 对称性

$$[\boldsymbol{P}_A^{\perp}]^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}_A^{\perp} \tag{10.2.31}$$

(2) 幂等性

$$\boldsymbol{P}_A^{\perp}\boldsymbol{P}_A^{\perp} = \boldsymbol{P}_A^{\perp} \tag{10.2.32}$$

(3) 与投影矩阵的正交性

$$P_A^{\perp}P_A = O \quad 或 \quad P_AP_A^{\perp} = O \quad (零矩阵) \tag{10.2.33}$$

由于 $P_A^{\perp}$ 与投影矩阵 P_A 正交，故 $P_A^{\perp}$ 称作正交投影矩阵。

下面举一个例子，说明投影矩阵和正交投影矩阵的构造方法，并验证它们所具有的性质。

例 10.2.1 给定向量 $v \in C^n$，其投影矩阵记作 P_v，定义为

$$P_v = \frac{vv^{\rm H}}{\|v\|^2} = v\langle v, v\rangle^{-1}v^{\rm H} \in C^{n\times n} \tag{10.2.34}$$

利用以上定义，容易验证投影矩阵 P_v 具有复共轭对称性

$$P_v^{\rm H} = P_v$$

和幂等性

$$P_v^2 = P_vP_v = P_v$$

借助投影矩阵，可将向量 x 到向量 v 上的投影表示成

$$P_vx = v\frac{\langle v, x\rangle}{\|v\|^2} \tag{10.2.35}$$

它是一个与 v 同方向的向量，而且其长度等于 x 在 v 方向上的长度。

此外，若定义正交投影矩阵

$$P_v^{\perp} \stackrel{\rm def}{=} I - P_v \in C^{n\times n} \tag{10.2.36}$$

则容易验证，这一正交投影矩阵 $P_v^{\perp}$ 具有与投影矩阵的正交性

$$\langle P_v^{\perp}, P_v\rangle = 0$$

复共轭对称性

$$(P_v^{\perp})^{\rm H} = P_v^{\perp}$$

以及幂等性

$$(P_v^{\perp})^2 = P_v^{\perp}P_v^{\perp} = P_v^{\perp}$$

10.2.6 投影矩阵的导数

令投影矩阵

$$P_A(\theta) = A(\theta)[A^{\rm H}(\theta)A(\theta)]^{-1}A^{\rm H}(\theta) = A(\theta)A^{\dagger}(\theta)$$

是某个向量 θ 的函数，式中，$A^{\dagger}(\theta) = [A^{\rm H}(\theta)A(\theta)]^{-1}A^{\rm H}(\theta)$ 是矩阵 $A(\theta)$ 的伪逆矩阵。为了书写的简洁，将 $P_A(\theta)$ 简记为 P。

下面介绍投影矩阵 $\boldsymbol{P}$ 关于向量 $\boldsymbol{\theta}=[\theta_1,\theta_2,\cdots,\theta_n]^{\mathrm{T}}$ 的各个元素 θ_i 的一阶与二阶导数。这些结果是由 Golub 与 Pereyra 最早给出的 [181]。

定义投影矩阵关于 θ_i 的一阶偏导数为

$$\boldsymbol{P}_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \boldsymbol{P}}{\partial \theta_i} \tag{10.2.37}$$

利用求导数的链式法则，得

$$\boldsymbol{P}_i = \boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger} + \boldsymbol{A}\boldsymbol{A}_i^{\dagger} \tag{10.2.38}$$

式中

$$\boldsymbol{A}_i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial \theta_i} \tag{10.2.39}$$

$$\boldsymbol{A}_i^{\dagger} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial \boldsymbol{A}^{\dagger}}{\partial \theta_i} \tag{10.2.40}$$

分别是矩阵 $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{\theta})$ 和伪逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}(\boldsymbol{\theta})$ 关于 θ_i 的偏导数。

在经过某些代数运算后，可得伪逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 的一阶偏导数为

$$\boldsymbol{A}_i^{\dagger} = (\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}_i^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}^{\perp} - \boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger} \tag{10.2.41}$$

综合式 (10.2.38) 和式 (10.2.41) 得到

$$\boldsymbol{P}_i = \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger} + (\boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}} \tag{10.2.42}$$

由此式容易验证，正如所希望的那样，有 $\mathrm{tr}(\boldsymbol{P}_i)=0$，因为一个投影矩阵的迹只与投影矩阵投影到的子空间的维数有关。

投影矩阵的二阶偏导数为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_{i,j} =& \boldsymbol{P}_j^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger} + \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_{i,j}\boldsymbol{A}^{\dagger} + \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}_j^{\mathrm{H}} + \\ & (\boldsymbol{P}_j^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger} + \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_{i,j}\boldsymbol{A}^{\dagger} + \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}_j^{\mathrm{H}})^{\mathrm{H}}\end{aligned} \tag{10.2.43}$$

注意到 $\boldsymbol{P}_j^{\perp} = -\boldsymbol{P}_j$，并利用式 (10.2.41)，可以将式 (10.2.43) 表述为 [467]

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_{i,j} =& -\boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger} - (\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_{i,j}\boldsymbol{A}^{\dagger} + \\ & \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}^{\perp} - \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{A}^{\dagger} + \\ & [-\boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger} - (\boldsymbol{A}^{\dagger})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}} + \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_{i,j}\boldsymbol{A}^{\dagger} + \\ & \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i(\boldsymbol{A}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}_j^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}^{\perp} - \boldsymbol{P}^{\perp}\boldsymbol{A}_i\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}_j\boldsymbol{A}^{\dagger}]^{\mathrm{H}}\end{aligned} \tag{10.2.44}$$

投影矩阵的导数公式在涉及投影矩阵的某些估计子的统计性能分析时非常有用。对此应用感兴趣的读者可参考文献 [467]。

10.3 投影矩阵与正交投影矩阵的应用举例

上一节分别从数学和信号处理角度出发，引出了投影矩阵的概念。本节将通过举例，介绍投影矩阵和正交投影矩阵的几个典型应用。

10.3.1 投影梯度

考查一直接序列码分多址 (CDMA) 系统，它有 K 个用户。在经过一系列预处理后，接收机在第 n 个码元间隔的离散时间输出可用信号模型

$$y(n)=\sum_{k=1}^{K}A_kb_ks_k(n)+\sigma v(n),\quad n=0,1,\cdots,N-1 \tag{10.3.1}$$

表示。式中，$v(n)$ 为信道高斯白噪声；A_k,b_k 和 $s_k(n)$ 分别是第 k 个用户的接收幅值、信息字符序列和特征波形；σ^2 为一常数，表示高斯白噪声的方差。现在假定各个用户的信息字符从 $\{-1,+1\}$ 中独立地、等概率地选取，还假定特征波形的长度为 N，具有单位能量，即

$$\sum_{n=0}^{N-1}|s_k(n)|^2=1\quad 或\quad \langle \boldsymbol{s}_1,\boldsymbol{s}_1\rangle=1 \tag{10.3.2}$$

式中，$\boldsymbol{s}_k=[s_k(0),s_k(1),\cdots,s_k(N-1)]^{\mathrm T}$ 表示用户 k 的特征波形向量。

盲多用户检测问题的提法是：只已知一个码元间隔内的接收信号 $y(0),\cdots,y(N-1)$ 和期望用户的特征波形 $s_d(0),s_d(1),\cdots,s_d(N-1)$，估计期望用户发射的信息字符 b_d。这里，"盲"是指我们不知道其他用户的任何信息。不失一般性，假定用户 1 为期望用户。

定义

$$\boldsymbol{y}(n)=[y(0),y(1),\cdots,y(N-1)]^{\mathrm T}$$
$$\boldsymbol{v}(n)=[v(0),v(1),\cdots,v(N-1)]^{\mathrm T}$$

分别为接收信号向量和噪声向量，则式 (10.3.1) 可以用向量形式写作

$$\boldsymbol{y}(n)=A_1b_1(n)\boldsymbol{s}_1+\sum_{k=2}^{K}A_kb_k(n)\boldsymbol{s}_k+\sigma\boldsymbol{v}(n) \tag{10.3.3}$$

式中，第一项为期望用户的信号，第二项为所有其他用户 (统称干扰用户) 的干扰信号之和，第三项代表信道噪声。

现在针对期望用户 1，设计其在码元间隔 n 内的多用户检测器 $\boldsymbol{c}_1(n)$，则检测器输出为 $\boldsymbol{c}_1^{\mathrm T}(n)\boldsymbol{y}(n)=\langle\boldsymbol{c}_1,\boldsymbol{y}\rangle$。因此，在第 n 个码元间隔内的期望用户的二进制信息字符 +1 或 −1 可以使用

$$\hat{b}_1(n)=\mathrm{sgn}(\langle\boldsymbol{c}_1,\boldsymbol{y}\rangle)=\mathrm{sgn}(\boldsymbol{c}_1^{\mathrm T}(n)\boldsymbol{y}(n)) \tag{10.3.4}$$

检测。

将盲多用户检测器 c_1 分解为固定部分 s_1 与自适应调整部分 x_1 之和 [223]

$$c_1(n) = s_1 + x_1(n) \tag{10.3.5}$$

并且这两部分正交，即

$$\langle s_1, x_1(n)\rangle = 0 \tag{10.3.6}$$

因此，式 (10.3.5) 是一种典型的正交分解。

现在，在盲多用户检测器 $c_1(n)$ 的设计中，采用一种最小输出能量准则，即使得多用户检测器的平均输出能量 (MOE)

$$\text{MOE}(c_1) = \text{E}\left\{\langle c_1, y\rangle^2\right\} = \text{E}\left\{(c_1^{\text{T}}(n)y(n))^2\right\} \tag{10.3.7}$$

最小化。求平均输出能量关于 $c_1(n)$ 的无约束梯度，得

$$\nabla\text{MOE} = 2\text{E}\{\langle y, s_1 + x_1\rangle\}y \tag{10.3.8}$$

于是，盲多用户检测器 $c_1(n)$ 的自适应部分 $x_1(i)$ 的随机梯度自适应算法为

$$x_1(i) = x_1(i-1) - \mu\hat{\nabla}\text{MOE} \tag{10.3.9}$$

式中，$\hat{\nabla}$MOE 是 ∇MOE 的估计，这里采用数学期望直接用其瞬时值代替的梯度

$$\hat{\nabla}\text{MOE} = 2\langle y, s_1 + x_1\rangle y \tag{10.3.10}$$

称为瞬时梯度。此时，盲多用户检测器的随机梯度算法为

$$x_1(i) = x_1(i-1) - \mu\langle y, s_1 + x_1\rangle y \tag{10.3.11}$$

由正交约束式 (10.3.6) 知，在任何时刻 i，向量 $x_1(i)$ 都应该与特征波形向量 s_1 正交。因此，在随机梯度算法式 (10.3.11) 中的瞬时梯度 $\langle y, s_1 + x_1\rangle y$ 应该与 s_1 正交。这只要将式 (10.3.11) 改为

$$x_1(i) = x_1(i-1) - \mu\langle y, s_1 + x_1\rangle y_1 \tag{10.3.12}$$

即可，其中，y_1 是 y 中与 s_1 正交的分量，可用正交投影矩阵表示为

$$y_1 = P_{s_1}^{\perp} y = (I - P_{s_1})y \tag{10.3.13}$$

梯度 $2\langle y, s_1 + x_1\rangle y_1$ 称为投影梯度，因为 y_1 与 s_1 正交，是原观测数据向量 y 在 s_1 张成的子空间上的正交投影。

注意到

$$P_{s_1} = s_1\langle s_1, s_1\rangle^{-1}s_1^{\text{T}} = s_1 s_1^{\text{T}}$$

式中，使用了式 (10.3.2) 即 $\langle s_1, s_1\rangle = 1$。于是，式 (10.3.13) 为

$$y_1 = (I - s_1 s_1^{\text{T}})y = y - \langle y, s_1\rangle s_1 \tag{10.3.14}$$

将式 (10.3.14) 代入式 (10.3.12)，即得盲多用户检测器的最小均方 (LMS) 型自适应算法如下 [223]

$$\boldsymbol{x}_1(i) = \boldsymbol{x}_1(i-1) - \mu\langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{x}_1\rangle(\boldsymbol{y} - \langle \boldsymbol{y}, \boldsymbol{s}_1\rangle \boldsymbol{s}_1) \tag{10.3.15}$$

或写作

$$\boldsymbol{x}_1(i) = \boldsymbol{x}_1(i-1) - \mu Z(i)\left[\boldsymbol{y}(i) - Z_{\mathrm{MF}}(i)\boldsymbol{s}_1\right] \tag{10.3.16}$$

式中

$$Z_{\mathrm{MF}}(i) = \langle \boldsymbol{y}(i), \boldsymbol{s}_1\rangle$$
$$Z(i) = \langle \boldsymbol{y}(i), \boldsymbol{s}_1 + \boldsymbol{x}_1(i-1)\rangle$$

10.3.2 解相关

以上介绍了正交投影矩阵在移动通信的盲多用户检测的 LMS 型自适应算法中的应用。现在考查一般的 LMS 自适应算法。

假定 $\boldsymbol{u}(n)$ 是滤波器 $\boldsymbol{w}$ 的输入向量，并且 $d(n)$ 是滤波器在 n 时刻希望得到的输出响应 (简称期望输出)。现在，设计滤波器的一种自适应学习算法，使得滤波器在 n 时刻的实际输出 $\boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{u}(n)$ 与该时刻的期望输出 $d(n)$ 之间的均方误差为最小。这种滤波器称为 LMS 滤波器，其自适应学习算法的一般形式为

$$\boldsymbol{w}(n) = \boldsymbol{w}(n-1) + \mu(n)\boldsymbol{u}(n)e^*(n) \tag{10.3.17}$$

式中，$\mu(n)$ 是 LMS 算法在 n 时刻的学习速率或自适应步长；$e(n)$ 是滤波器在 n 时刻的误差信号，定义为

$$e(n) = d(n) - \boldsymbol{w}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n) \tag{10.3.18}$$

这种 LMS 算法是 Widrow 与 Hoff 于 1960 年提出的 [475]。现已被认为是最早的神经网络方法 [206]。

在 LMS 算法中，有一个独立性假设：假定横向滤波器的输入向量 $\boldsymbol{u}(1), \boldsymbol{u}(2), \cdots, \boldsymbol{u}(n)$ 是彼此统计独立的向量序列。当它们之间不满足统计独立的条件时，基本 LMS 算法的性能将下降，尤其是收敛速度会比较慢。因此，在这种情况下，就需要解除各时刻输入向量之间的相关 (这一操作称为“解相关”)，使它们尽可能保持统计独立。大量的研究表明 (文献 [175] 及其中有关参考文献)，解相关能够有效加快 LMS 算法的收敛速率。

令 $\boldsymbol{u}(n)$ 与 $\boldsymbol{u}(n-1)$ 在 n 时刻的相关系数为

$$a(n) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n)}{\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n-1)} = \langle \boldsymbol{u}(n-1), \boldsymbol{u}(n-1)\rangle^{-1}\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n) \tag{10.3.19}$$

显然，$a(n)\boldsymbol{u}(n-1)$ 代表了 $\boldsymbol{u}(n)$ 中与 $\boldsymbol{u}(n-1)$ 相关的部分。若从 $\boldsymbol{u}(n)$ 中减去该部

分，则这一减法运算相当于"解相关"。解相关的结果为

$$\boldsymbol{v}(n) = \boldsymbol{u}(n) - a(n)\boldsymbol{u}(n-1) \tag{10.3.20}$$

$$= \boldsymbol{u}(n) - \boldsymbol{u}(n-1)\langle\boldsymbol{u}(n-1), \boldsymbol{u}(n-1)\rangle^{-1}\boldsymbol{u}^{\mathrm{H}}(n-1)\boldsymbol{u}(n) \tag{10.3.21}$$

$$= \boldsymbol{u}(n) - \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{u}(n-1)}\boldsymbol{u}(n) \tag{10.3.22}$$

$$= \boldsymbol{P}^{\perp}_{\boldsymbol{u}(n-1)}\boldsymbol{u}(n) \tag{10.3.23}$$

这说明，从 $\boldsymbol{u}(n)$ 中解除与 $\boldsymbol{u}(n-1)$ 相关的部分，等价于求 n 时刻的输入向量 $\boldsymbol{u}(n)$ 在 $(n-1)$ 时刻的输入向量 $\boldsymbol{u}(n-1)$ 张成的子空间上的正交投影。于是，在 LMS 自适应学习算法中使用解相关的输入向量 $\boldsymbol{v}(n)$ 代替原来的输入向量 $\boldsymbol{u}(n)$，便得到所谓的时域解相关 LMS 算法 [127]。有关解相关的 LMS 算法，已在 5.5 节讨论过。

下面以前向和后向预测滤波器为例，说明如何用投影矩阵表示滤波器。

10.3.3 前向预测滤波器的表示

假定滤波器的输入和抽头权系数均为实数。为方便叙述，先引入时移向量

$$z^{-j}\boldsymbol{x}(n) = [0, \cdots, 0, x(1), \cdots, x(n-j)]^{\mathrm{T}} \tag{10.3.24}$$

注意，这里 z^{-j} 只是代表一个时间上移位的算子，而不要把它当成一种乘法。此外，约定离散时间变量的起点为 1，即 $x(n)=0$ 对所有 $n \leqslant 0$。

考虑 m 阶前向预测滤波器

$$\hat{x}(k) = \sum_{i=1}^{m} w_i^{\mathrm{f}}(n)x(k-i), \qquad k = 1, 2, \cdots, n \tag{10.3.25}$$

式中，$w_i^{\mathrm{f}}(n), i = 1, 2, \cdots, m$ 表示 n 时刻的滤波器权系数向量。将上式写成矩阵方程，则有

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x(1) & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x(n-1) & x(n-2) & \cdots & x(n-m) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1^{\mathrm{f}}(n) \\ w_2^{\mathrm{f}}(n) \\ \vdots \\ w_m^{\mathrm{f}}(n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \hat{x}(1) \\ \hat{x}(2) \\ \vdots \\ \hat{x}(n) \end{bmatrix} \tag{10.3.26}$$

定义数据矩阵

$$\boldsymbol{X}_{1,m}(n) \stackrel{\mathrm{def}}{=} [z^{-1}\boldsymbol{x}(n), z^{-2}\boldsymbol{x}(n), \cdots, z^{-m}\boldsymbol{x}(n)] = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 \\ x(1) & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x(n-1) & x(n-2) & \cdots & x(n-m) \end{bmatrix}$$

并分别定义 m 级前向预测系数向量 $\boldsymbol{w}_m^{\mathrm{f}}(n)$ 和前向预测值向量 $\hat{\boldsymbol{x}}(n)$ 为

$$\boldsymbol{w}_m^{\mathrm{f}}(n) \stackrel{\mathrm{def}}{=} [w_1^{\mathrm{f}}(n), w_2^{\mathrm{f}}(n), \cdots, w_m^{\mathrm{f}}(n)]^{\mathrm{T}} \tag{10.3.27}$$

$$\hat{\boldsymbol{x}}(n) \stackrel{\mathrm{def}}{=} [\hat{x}(1), \hat{x}(2), \cdots, \hat{x}(n)]^{\mathrm{T}} \tag{10.3.28}$$

则式 (10.3.26) 可以用简洁的形式写作

$$\boldsymbol{X}_{1,m}(n)\boldsymbol{w}_m^{\rm f}(n) = \hat{\boldsymbol{x}}(n) \tag{10.3.29}$$

为了求出前向预测形式向量的最小二乘估计，用 $\boldsymbol{x}(n)$ 代替上式中的 $\hat{\boldsymbol{x}}(n)$，便得到

$$\boldsymbol{w}_m^{\rm f}(n) = \langle \boldsymbol{X}_{1,m}^{\rm T}(n), \boldsymbol{X}_{1,m}(n)\rangle^{-1}\boldsymbol{X}_{1,m}^{\rm T}(n)\boldsymbol{x}(n) \tag{10.3.30}$$

将式 (10.3.30) 代入式 (10.3.29)，并使用投影矩阵符号，即可将前向预测值向量表示为

$$\hat{\boldsymbol{x}}(n) = \boldsymbol{P}_{1,m}(n)\boldsymbol{x}(n) \tag{10.3.31}$$

式中，$\boldsymbol{P}_{1,m}(n) = \boldsymbol{X}_{1,m}(n)\langle \boldsymbol{X}_{1,m}^{\rm T}(n), \boldsymbol{X}_{1,m}(n)\rangle^{-1}\boldsymbol{X}_{1,m}^{\rm T}(n)$ 表示数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{1,m}(n)$ 的投影矩阵。

若定义前向预测误差向量

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}_m^{\rm f}(n) &= [e_m^{\rm f}(1), e_m^{\rm f}(2), \cdots, e_m^{\rm f}(n)]^{\rm T} \\ &= \boldsymbol{x}(n) - \hat{\boldsymbol{x}}(n)\end{aligned} \tag{10.3.32}$$

式中，$e_m^{\rm f}(k), k = 1, 2, \cdots, n$ 是滤波器在 k 时刻的前向预测误差，则由式 (10.3.31) 及正交投影矩阵的定义立即知

$$\boldsymbol{e}_m^{\rm f}(n) = \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n) \tag{10.3.33}$$

式 (10.3.31) 和式 (10.3.33) 的物理解释是：前向预测值向量 $\hat{\boldsymbol{x}}(n)$ 和前向预测误差向量 $\boldsymbol{e}_m^{\rm f}(n)$ 分别是数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 在数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{1,m}(n)$ 所张成的子空间上的投影和正交投影。

10.3.4 后向预测滤波器的表示

考虑后向预测滤波器

$$\hat{x}(k-m) = \sum_{i=1}^{m} w_i^{\rm b}(n)x(k-m+i), \qquad k = 1, 2, \cdots, n \tag{10.3.34}$$

式中，$w_i^{\rm b}(n), i = 1, 2, \cdots, m$ 为 m 阶后向预测滤波器在 n 时刻的权系数。使用矩阵和向量书写上式，得

$$\begin{bmatrix} x(1) & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x(m) & x(m-1) & \cdots & 0 \\ x(m+1) & x(m) & \cdots & x(1) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ x(n) & x(n-1) & \cdots & x(n-m+1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_m^{\rm b}(n) \\ w_{m-1}^{\rm b}(n) \\ \vdots \\ w_1^{\rm b}(n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \hat{x}(1) \\ \vdots \\ \hat{x}(n-m) \end{bmatrix} \tag{10.3.35}$$

或

$$\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n)\boldsymbol{w}_m^{\rm b}(n) = z^{-m}\hat{\boldsymbol{x}}(n) \tag{10.3.36}$$

式中

$$\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n)=[z^{0}\boldsymbol{x}(n),z^{-1}\boldsymbol{x}(n),\cdots,z^{-m+1}\boldsymbol{x}(n)]$$
$$=\begin{bmatrix}x(1)&0&\cdots&0\\x(2)&x(1)&\cdots&0\\\vdots&\vdots&&\vdots\\x(n)&x(n-1)&\cdots&x(n-m+1)\end{bmatrix}\tag{10.3.37}$$

$$\boldsymbol{w}_m^{\mathrm{b}}(n)=[w_m^{\mathrm{b}}(n),w_{m-1}^{\mathrm{b}}(n),\cdots,w_1^{\mathrm{b}}(n)]^{\mathrm{T}}\tag{10.3.38}$$

$$\hat{\boldsymbol{x}}(n-m)=z^{-m}\hat{\boldsymbol{x}}(n)=[0,\cdots,0,\hat{x}(1),\cdots,\hat{x}(n-m)]^{\mathrm{T}}\tag{10.3.39}$$

在式 (10.3.36) 中用已知的数据向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 代替未知的预测值向量 $\hat{\boldsymbol{x}}(n)$，即可得到后向预测滤波器权向量的最小二乘解为

$$\boldsymbol{w}_m^{\mathrm{b}}(n)=\langle\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n),\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n)\rangle^{-1}\boldsymbol{X}_{0,m-1}^{\mathrm{T}}(n)\boldsymbol{x}(n-m)\tag{10.3.40}$$

将式 (10.3.40) 代入式 (10.3.36)，后向预测 (值) 向量可用投影矩阵表示为

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{x}}(n-m)&=\boldsymbol{P}_{0,m-1}(n)\boldsymbol{x}(n-m)\\&=\boldsymbol{P}_{0,m-1}(n)z^{-m}\boldsymbol{x}(n)\end{aligned}\tag{10.3.41}$$

式中，$\boldsymbol{P}_{0,m-1}(n)=\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n)\langle\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n),\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n)\rangle^{-1}\boldsymbol{X}_{0,m-1}^{\mathrm{T}}(n)$ 是 $\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n)$ 的投影矩阵。

定义后向预测误差向量

$$\begin{aligned}\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n)&=[e_m^{\mathrm{b}}(1),e_m^{\mathrm{b}}(2),\cdots,e_m^{\mathrm{b}}(n)]^{\mathrm{T}}\\&=\boldsymbol{x}(n-m)-\hat{\boldsymbol{x}}(n-m)\end{aligned}\tag{10.3.42}$$

式中，$e_m^{\mathrm{b}}(k)\ (k=1,2,\cdots,n)$ 是 k 时刻的后向预测误差，则将式 (10.3.41) 代入式 (10.3.42) 后，又可用正交投影矩阵来表示后向预测误差向量，即有

$$\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n)=\boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n)z^{-m}\boldsymbol{x}(n)\tag{10.3.43}$$

式 (10.3.41) 和式 (10.3.42) 的物理涵义如下：后向预测向量 $\hat{\boldsymbol{x}}(n-m)$ 和后向预测误差向量 $\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n)$ 分别是移位的数据向量 $z^{-m}\boldsymbol{x}(n)$ 在数据矩阵 $\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n)$ 所张成子空间上的投影和正交投影。

例 10.3.1 假定观测数据矩阵为 $\boldsymbol{X}_{N\times M}$，现在希望设计一 $M\times 1$ 阶滤波器向量 $\boldsymbol{w}$ 拟合向量 $\boldsymbol{y}$，则观测方程可以写作

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}+\boldsymbol{e}\tag{10.3.44}$$

式中，$\boldsymbol{e}$ 为拟合误差向量。设最优滤波器为 $\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}$，其估计误差向量为 $\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}$，则

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}+\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}\tag{10.3.45}$$

两边同乘 $(\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}$，即有

$$\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y} - (\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}} \tag{10.3.46}$$

根据前面的分析，滤波器的最小二乘估计为

$$\boldsymbol{w}_{\mathrm{LS}} = (\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{y} \tag{10.3.47}$$

将式 (10.3.46) 代入上式，即得

$$\boldsymbol{w}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}} + (\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}} \tag{10.3.48}$$

于是，有

$$\boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{y} - \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}} - \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}$$

由上式、式 (10.3.46) 和式 (10.3.47)，立即得

$$(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}} \tag{10.3.49}$$

最小二乘估计

$$\hat{\boldsymbol{y}} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{w}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}\boldsymbol{y} \tag{10.3.50}$$

式中，$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{X})^{-}\boldsymbol{X}^{\mathrm{T}}$ 表示观测数据矩阵 $\boldsymbol{X}$ 的投影矩阵。于是，估计误差向量

$$\boldsymbol{e}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{y} - \hat{\boldsymbol{y}} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{y} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}} \tag{10.3.51}$$

式中，使用了式 (10.3.49)。

估计误差平方和

$$E_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{e}_{\mathrm{LS}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_{\mathrm{LS}} = \boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}} = \boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}} \tag{10.3.52}$$

估计误差平方和的数学期望值称为均方误差，即有

$$\begin{aligned}\mathrm{E}\{E_{\mathrm{LS}}\} &= \mathrm{E}\{\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}\} = \mathrm{E}\left\{\mathrm{tr}[(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}^{\mathrm{H}}]\right\} \\ &= \mathrm{tr}\left[(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P})\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}^{\mathrm{H}}\}\right]\end{aligned}$$

式中，利用了矩阵的迹的性质 $\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \mathrm{tr}(\boldsymbol{A}\boldsymbol{x}\boldsymbol{x}^{\mathrm{H}})$。令 $\sigma_{\mathrm{opt}}^2 = \mathrm{E}\{\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_{\mathrm{opt}}\}$ 表示最优滤波器的均方误差。于是，上式可以写为

$$\mathrm{E}\{E_{\mathrm{LS}}\} = \sigma_{\mathrm{opt}}^2\mathrm{tr}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}) \tag{10.3.53}$$

计算矩阵的迹，得

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}) &= \mathrm{tr}[\boldsymbol{I} - \boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}] \\ &= \mathrm{tr}(\boldsymbol{I}_N) - \mathrm{tr}[\boldsymbol{X}(\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}] \\ &= \mathrm{tr}(\boldsymbol{I}_N) - \mathrm{tr}[(\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X})^{-1}\boldsymbol{X}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{X}] \\ &= \mathrm{tr}(\boldsymbol{I}_N) - \mathrm{tr}(\boldsymbol{I}_M) \\ &= N - M\end{aligned}$$

将此值代入式 (10.3.53)，则

$$\mathrm{E}\{E_{\mathrm{LS}}\} = (N-M)\sigma_{\mathrm{opt}}^2 \tag{10.3.54}$$

这说明，最小二乘滤波器的均方误差 $\mathrm{E}\{\boldsymbol{e}_{\mathrm{LS}}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}_{\mathrm{LS}}\}$ 是最优滤波器的均方误差 σ_{opt}^2 的 $(N-M)$ 倍。

10.4 投影矩阵和正交投影矩阵的更新

自适应滤波器在很多工程问题中有着广泛的应用。所谓自适应滤波器，就是滤波器系数可以随时间作自适应的调节，以使得滤波器的输出能够满足某些实际需要。滤波器系数的自适应调节依靠的是简单的时间更新公式，因为复杂的计算不能够满足信号处理的实时要求。因此，为了将投影矩阵和正交投影矩阵应用于自适应滤波器的设计中，需要推导出这两种矩阵的时间更新公式。

假定目前的数据空间为 $\{\boldsymbol{U}\}$，相对应的投影矩阵是 $\boldsymbol{P}_U$，正交投影矩阵为 $\boldsymbol{P}_U^{\perp}$。这里，$\boldsymbol{U}$ 取 $\boldsymbol{X}_{1,m}(n)$ 或 $\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n)$ 等形式。现在假设有一个新的数据向量 $\boldsymbol{u}$ 加入到 $\{\boldsymbol{U}\}$ 的原向量组中。一般说来，新数据向量 $\boldsymbol{u}$ 将提供某些新的信息，它们是在 $\{\boldsymbol{U}\}$ 的原向量组中没有包含的。由于数据子空间从 $\{\boldsymbol{U}\}$ 扩大为 $\{\boldsymbol{U},\boldsymbol{u}\}$，所以应该寻找与新子空间对应的“新的”投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{U,u}$ 和正交投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{U,u}^{\perp}$。

从自适应更新的角度出发，由已知的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_U$ 求更新的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{U,u}$ 的最简单方法是将 $\boldsymbol{P}_{U,u}$ 分解为两部分：一部分是非自适应部分或已知部分，另一部分为自适应更新部分。存在一种特别有用的分解方式，即要求非自适应部分与自适应部分彼此正交。这样一种分解称为“正交分解”。具体说来，投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{U,u}$ 的正交分解为

$$\boldsymbol{P}_{U,u} = \boldsymbol{P}_U + \boldsymbol{P}_w \tag{10.4.1}$$

式中，$\boldsymbol{P}_w$ 的选择应满足正交条件

$$\langle \boldsymbol{P}_U, \boldsymbol{P}_w \rangle = \boldsymbol{0} \tag{10.4.2}$$

或简记作 $\boldsymbol{P}_w \perp \boldsymbol{P}_U$。

由于更新是通过原投影矩阵 $\boldsymbol{P}_U$ 和新数据向量 $\boldsymbol{u}$ 实现的，而 $\boldsymbol{P}_U$ 中不包含新数据向量的任何作用，所以正交分解中的更新部分 $\boldsymbol{P}_w$ 应该包含有新数据向量 $\boldsymbol{u}$。不妨令 $\boldsymbol{w}=\boldsymbol{X}\boldsymbol{u}$，即 $\boldsymbol{P}_w = \boldsymbol{X}\boldsymbol{u}\langle \boldsymbol{X}\boldsymbol{u}, \boldsymbol{X}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}}$。将 $\boldsymbol{P}_w$ 代入正交条件 (10.4.2)，则有

$$\langle \boldsymbol{P}_U, \boldsymbol{P}_w \rangle = \boldsymbol{P}_U\boldsymbol{X}\boldsymbol{u}\langle \boldsymbol{X}\boldsymbol{u}, \boldsymbol{X}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}(\boldsymbol{X}\boldsymbol{u})^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{0}$$

这里使用了投影矩阵的对称性 $\boldsymbol{P}_U^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{P}_U$。由于 $\boldsymbol{w} = \boldsymbol{X}\boldsymbol{u} \neq \boldsymbol{0}$，故上式意味着 $\boldsymbol{P}_U\boldsymbol{X}\boldsymbol{u} = \boldsymbol{0}$。为使这一条件对任意向量 $\boldsymbol{u}$ 恒成立，要求 $\boldsymbol{P}_U\boldsymbol{X} = \boldsymbol{0}$。这意味着 $\boldsymbol{X}$ 应该是正交投影矩阵 $\boldsymbol{P}_U^{\perp}$。

综合以上讨论，得到正交分解式 (10.4.1) 中的向量 $\boldsymbol{w}$ 为

$$\boldsymbol{w} = \boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u} \tag{10.4.3}$$

即是说，$\boldsymbol{w}$ 是数据向量 $\boldsymbol{u}$ 在数据矩阵 $\boldsymbol{U}$ 上的正交投影。

利用投影矩阵的定义式，易求出

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_w &= \boldsymbol{w}\langle\boldsymbol{w},\boldsymbol{w}\rangle^{-1}\boldsymbol{w}^{\mathrm{T}}\\ &= \boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\langle\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}_U^{\perp}\end{aligned} \tag{10.4.4}$$

式中，使用了正交投影矩阵的对称性 $[\boldsymbol{P}_U^{\perp}]^{\mathrm{T}} = \boldsymbol{P}_U^{\perp}$。

将式 (10.4.4) 代入正交分解 (10.4.1)，便得到“新的”投影矩阵的更新公式如下：

$$\boldsymbol{P}_{U,u} = \boldsymbol{P}_U + \boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\langle\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}_U^{\perp} \tag{10.4.5}$$

再使用正交投影矩阵的定义式，又可得到“新的”正交投影矩阵的更新公式：

$$\boldsymbol{P}_{U,u}^{\perp} = \boldsymbol{P}_U^{\perp} - \boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\langle\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}_U^{\perp} \tag{10.4.6}$$

式 (10.4.5) 和式 (10.4.6) 分别组成了投影矩阵和正交投影矩阵的更新，它是向量更新和标量更新的基础。在前面已看到，向量 $\boldsymbol{x}(n)$ 的前向线性预测 $\hat{\boldsymbol{x}}(n)$ 可以写成 $\hat{\boldsymbol{x}}(n) = \boldsymbol{P}_{1,m}(n)\boldsymbol{u}$，而其预测误差向量 $\boldsymbol{e}(n) = \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)$。为了推导一般向量 $\boldsymbol{P}_U\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{y}$ 的更新公式，我们用 $\boldsymbol{y}$ 分别右乘式 (10.4.5) 和式 (10.4.6)，得到

$$\boldsymbol{P}_{U,u}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}_U\boldsymbol{y} + \boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\langle\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{y}\rangle \tag{10.4.7}$$

$$\boldsymbol{P}_{U,u}^{\perp}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{y} - \boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\langle\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{y}\rangle \tag{10.4.8}$$

在最小二乘滤波中，还常常需要对某个标量 (例如 n 时刻的预测误差和残差) 进行分析，由于两个向量的内积为一标量，所以若用向量 $\boldsymbol{z}$ 左乘式 (10.4.7) 和式 (10.4.8)，即可得到更新公式

$$\langle\boldsymbol{z},\boldsymbol{P}_{U,u}\boldsymbol{y}\rangle = \langle\boldsymbol{z},\boldsymbol{P}_U\boldsymbol{y}\rangle + \langle\boldsymbol{z},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle\langle\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{y}\rangle \tag{10.4.9}$$

$$\langle\boldsymbol{z},\boldsymbol{P}_{U,u}^{\perp}\boldsymbol{y}\rangle = \langle\boldsymbol{z},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{y}\rangle - \langle\boldsymbol{z},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle\langle\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}\langle\boldsymbol{u},\boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{y}\rangle \tag{10.4.10}$$

10.5 格型自适应滤波器设计

上一节推导了投影矩阵与正交投影矩阵的递推公式。现在，以自适应格型滤波器为例，说明这些递推公式的应用。我们将看到，在式 (10.4.7)、式 (10.4.8)、式 (10.4.9) 和式 (10.4.10) 中巧妙地选择 $\boldsymbol{U},\boldsymbol{u},\boldsymbol{z}$ 和 $\boldsymbol{y}$，就可以直接导出非对称结构的格型滤波器的全部时间更新和阶数更新公式。

图 10.5.1 画出了 LS 格型自适应滤波器的结构图。这种滤波器的前向反射系数 K_{m+1}^{f} 和后向反射系数 K_{m+1}^{b} 不同，是一种非对称的结构。

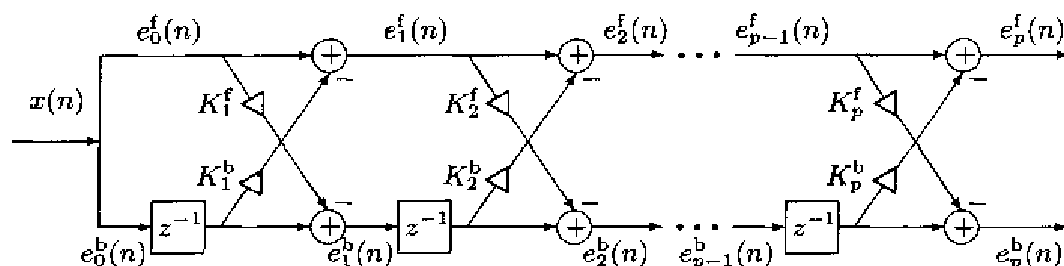


图 10.5.1 LS 自适应格型滤波器的结构

由图 10.5.1 可以写出前、后向预测误差的方程，即有

$$e_{m+1}^{\mathrm{f}}(n) = e_m^{\mathrm{f}}(n) - K_{m+1}^{\mathrm{b}}(n)e_m^{\mathrm{b}}(n-1) \tag{10.5.1}$$

$$e_{m+1}^{\mathrm{b}}(n) = -K_{m+1}^{\mathrm{f}}(n)e_m^{\mathrm{f}}(n) + e_m^{\mathrm{b}}(n-1) \tag{10.5.2}$$

上述方程表明了以下事实：

(1) 第 $m+1$ 级滤波器在 n 时刻的前 (或后) 向预测误差不仅与前一级 n 时刻的前向预测误差 $e_m^{\mathrm{f}}(n)$ 有关，而且还决定于前一级 $n-1$ 时刻的后向预测误差 $e_m^{\mathrm{b}}(n-1)$。换句话说，这种格型滤波器存在着前、后级之间的耦合。

(2) 格型滤波器设计的核心问题就是推导前、后向反射系数的递推公式，即如何使用前级滤波器的有关参数递推出本级的前、后向反射系数。

(3) 格型滤波器既含有阶数递推 (本级参数与前级参数有关)，又包含了时间递推 (本时刻的滤波器参数与前一时刻的参数有关)。

毋庸待言，前、后级滤波器的耦合大大增加了格型滤波器的设计难度，因为它们不能够各级独立设计。幸运的是，投影矩阵和正交投影矩阵可以完全克服这一设计困难。

格型滤波器设计采用使滤波器在每个时刻的前、后向预测误差平方和为最小的准则。9.3 节推导了前向预测误差向量 $\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n)$ 的表达式 (10.3.33) 和后向预测误差向量 $\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n)$ 的表达式 (10.3.43)。如果只对 n 时刻的预测误差 (标量) 感兴趣，就需要从 $\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n)$ 和 $\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n)$ 中分别抽取出第 n 个分量。为此，引入 n 个分量的单位向量 (也叫抽取向量)

$$\boldsymbol{\pi}(n) = [0, \cdots, 0, 1]^{\mathrm{T}}$$

则现时刻的前、后向预测误差很容易用两个向量的内积来表示：

$$e_m^{\mathrm{f}}(n) = \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n) \rangle = \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n) \rangle \tag{10.5.3}$$

$$e_m^{\mathrm{b}}(n) = \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n) \rangle = \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n)z^{-m}\boldsymbol{x}(n) \rangle \tag{10.5.4}$$

前、后向预测残差分别定义为时刻 1 到时刻 n 的前、后向预测误差的平方和，即

$$\epsilon_m^{\mathrm{f}}(n) = \langle \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n) \rangle \tag{10.5.5}$$

$$\epsilon_m^{\mathrm{b}}(n) = \langle \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n) \rangle \tag{10.5.6}$$

利用 z^{-1} 算子的移位性能，还可得到 $n-1$ 时刻的前、后向预测残差的表达式：

$$\epsilon_m^{\mathrm{f}}(n-1)=\langle z^{-1}\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n), z^{-1}\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n)\rangle \tag{10.5.7}$$

$$\epsilon_m^{\mathrm{b}}(n-1)=\langle z^{-1}\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n), z^{-1}\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n)\rangle \tag{10.5.8}$$

在推导格型滤波器的更新公式之前，先证明一个有用的公式：

$$z^{-1}\boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n)z^{-m}=\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)z^{-m-1} \tag{10.5.9}$$

证明 利用 z^{-1} 的移位性质，易知对任意一向量 $\boldsymbol{y}(n)$，有

$$\begin{aligned}z^{-1}\boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n)z^{-m}\boldsymbol{y}(n)&=\boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n-1)z^{-m}\boldsymbol{y}(n-1)\\&=\boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n-1)z^{-m-1}\boldsymbol{y}(n)\end{aligned} \tag{10.5.10}$$

注意到

$$\begin{aligned}\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n-1)&=z^{-1}[z^{0}\boldsymbol{x}(n), z^{-1}\boldsymbol{x}(n),\cdots,z^{-m+1}\boldsymbol{x}(n)]^{\mathrm{T}}\\&=[z^{-1}\boldsymbol{x}(n), z^{-2}\boldsymbol{x}(n),\cdots,z^{-m}\boldsymbol{x}(n)]^{\mathrm{T}}\\&=\boldsymbol{X}_{1,m}(n)\end{aligned}$$

故

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n-1)&=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n-1)\langle\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n-1),\boldsymbol{X}_{0,m-1}(n-1)\rangle^{-1}\boldsymbol{X}_{0,m-1}^{\mathrm{T}}(n-1)\\&=\boldsymbol{I}-\boldsymbol{X}_{1,m}(n)\langle\boldsymbol{X}_{1,m}(n),\boldsymbol{X}_{1,m}(n)\rangle^{-1}\boldsymbol{X}_{1,m}^{\mathrm{T}}(n)\\&=\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\end{aligned}$$

于是，式 (10.5.10) 可以写作

$$z^{-1}\boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n)z^{-m}\boldsymbol{y}(n)=\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)z^{-m-1}\boldsymbol{y}(n)$$

上式对任意向量 $\boldsymbol{y}(n)$ 均成立，这意味着式 (10.5.9) 为真。 ■

下面考虑由式 (10.5.3) 定义的前向预测误差 $e_{m+1}^{\mathrm{f}}(n)=\langle\boldsymbol{\pi}(n),\boldsymbol{P}_{1,m+1}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\rangle$ 的递推公式。

利用式 (10.5.9) 和式 (10.3.43)，有

$$\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n)=z^{-1}\boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n)z^{-m}\boldsymbol{x}(n)=z^{-1}\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n)=\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1) \tag{10.5.11}$$

在式 (10.4.10) 中，令 $\boldsymbol{z}=\boldsymbol{\pi}(n),\boldsymbol{U}=\boldsymbol{X}_{1,m}(n),\boldsymbol{u}=z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n),\boldsymbol{y}=\boldsymbol{x}(n)$，则易知

$$\{\boldsymbol{U},\boldsymbol{u}\}=\{\boldsymbol{X}_{1,m}(n),z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n)\}=\{\boldsymbol{X}_{1,m+1}(n)\} \tag{10.5.12}$$

从而有

$$\left.\begin{aligned}\boldsymbol{P}_{U}^{\perp}&=\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\\\boldsymbol{P}_{U,u}^{\perp}&=\boldsymbol{P}_{1,m+1}^{\perp}(n)\\\boldsymbol{P}_{U}^{\perp}\boldsymbol{u}&=\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n)=\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1)\\\boldsymbol{P}_{U}^{\perp}\boldsymbol{y}&=\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\\\boldsymbol{P}_{U,u}^{\perp}\boldsymbol{y}&=\boldsymbol{P}_{1,m+1}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\end{aligned}\right\} \tag{10.5.13}$$

在得到上面第二个等式的过程中使用了式 (10.5.11) 的结果。

将式 (10.5.13) 代入式 (10.4.10)，并利用正交投影矩阵的幂等性和式 (10.5.11)，则有

$$
\begin{aligned}
e_{m+1}^{\mathrm{f}}(n) &= \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{P}_{1,m+1}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\rangle \\
&= \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\rangle - \frac{\langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1)\rangle\langle \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n), z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n)\rangle}{\langle \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1)\rangle} \\
&= \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\rangle - \frac{\langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1)\rangle\langle \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n)\rangle}{\langle \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1)\rangle} \\
&= \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\rangle - \frac{\langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1)\rangle\langle \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1)\rangle}{\langle \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1)\rangle} \\
&= e_m^{\mathrm{f}}(n) - \frac{\langle z^{-1}\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n)\rangle}{\epsilon_m^{\mathrm{b}}(n-1)} e_m^{\mathrm{b}}(n-1)
\end{aligned} \tag{10.5.14}
$$

定义偏相关系数

$$
\Delta_{m+1}(n) = \langle \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1)\rangle = \langle \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n-1), \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n)\rangle \tag{10.5.15}
$$

然后将式 (10.5.14) 与式 (10.5.1) 加以比较，即知第 $m+1$ 级格型滤波器在 n 时刻的后向反射系数 $K_{m+1}^{\mathrm{b}}(n)$ 为

$$
K_{m+1}^{\mathrm{b}}(n) = \frac{\Delta_{m+1}(n)}{\epsilon_m^{\mathrm{b}}(n-1)} \tag{10.5.16}
$$

为了推导前向反射系数 $K_{m+1}^{\mathrm{f}}(n)$ 的更新公式，在式 (10.4.10) 中令 $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{X}_{1,m}(n), \boldsymbol{u} = \boldsymbol{x}(n)$, $\boldsymbol{y} = z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n)$。利用子空间 $\{\boldsymbol{U}, \boldsymbol{u}\}$ 和 $\{\boldsymbol{u}, \boldsymbol{U}\}$ 等价这一直观的事实，得到

$$
\{\boldsymbol{X}_{1,m}(n), \boldsymbol{x}(n)\} = \{\boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{X}_{1,m}(n)\} = \{\boldsymbol{X}_{0,m}(n)\} \tag{10.5.17}
$$

于是，采用与前面类似的推导，又可得到后向预测误差的阶数更新公式 (10.5.2) 中的前向反射系数的表达式：

$$
K_{m+1}^{\mathrm{f}}(n) = \frac{\Delta_{m+1}(n)}{\epsilon_m^{\mathrm{f}}(n)} \tag{10.5.18}
$$

综合以上讨论，有以下结论：

(1) 格型自适应滤波算法由式 (10.5.1) 和式 (10.5.2) 组成，其关键是前、后向反射系数 $K_{m+1}^{\mathrm{f}}(n)$ 和 $K_{m+1}^{\mathrm{b}}(n)$ 的递推计算。

(2) 前向反射系数 $K_{m+1}^{\mathrm{f}}(n)$ 决定于偏相关系数 $\Delta_{m+1}(n)$ 和前向预测残差 $\epsilon_m^{\mathrm{f}}(n)$，而后向反射系数 $K_{m+1}^{\mathrm{b}}(n)$ 决定于偏相关系数 $\Delta_{m+1}(n)$ 和后向预测残差 $\epsilon_m^{\mathrm{b}}(n-1)$。

这表明，自适应更新滤波器的设计现在转化为偏相关系数 $\Delta_{m+1}(n)$、前向预测残差 $\epsilon_m^{\mathrm{f}}(n)$、后向预测残差 $\epsilon_m^{\mathrm{b}}(n)$、前向反射系数 $K_{m+1}^{\mathrm{f}}(n)$ 和后向反射系数 $K_{m+1}^{\mathrm{b}}(n)$ 的更新公式的推导。

下面推导前、后向预测残差的更新公式。为此，将 $\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n) = \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)$ 代入前向预

测残差的定义式 (10.5.5)，可得

$$\begin{aligned}\epsilon_m^{\rm f}(n) &= \langle \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\rangle \\ &= \boldsymbol{x}^{\rm T}(n)[\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)]^{\rm T}\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n) \\ &= \boldsymbol{x}^{\rm T}(n)\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n) \\ &= \langle \boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\rangle \end{aligned} \tag{10.5.19}$$

这里使用了正交投影矩阵的对称性和幂等性 $[\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)]^{\rm T}\boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n) = \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n) \times \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n) = \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)$。类似地，由后向预测残差的定义式 (10.5.6)，又可推出

$$\epsilon_m^{\rm b}(n) = \langle z^{-m}\boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n-m)\rangle \tag{10.5.20}$$

在式 (10.4.10) 中令 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y} = \boldsymbol{x}(n)$, $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{X}_{1,m}(n)$, $\boldsymbol{u} = z^{-m-1}\boldsymbol{X}(n)$，容易导出前向预测残差的更新公式：

$$\epsilon_{m+1}^{\rm f}(n) = \epsilon_m^{\rm f}(n) - \frac{\Delta_{m+1}^2(n)}{\epsilon_m^{\rm b}(n-1)} \tag{10.5.21}$$

式中，$\Delta_{m+1}^2(n) = \Delta_{m+1}(n)\Delta_{m+1}(n)$。

在式 (10.4.10) 中再令 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y} = z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n)$, $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{X}_{1,m}(n)$, $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{x}(n)$，又可得到后向预测残差的更新公式为

$$\epsilon_{m+1}^{\rm b}(n) = \epsilon_m^{\rm b}(n-1) - \frac{\Delta_{m+1}^2(n)}{\epsilon_m^{\rm f}(n)} \tag{10.5.22}$$

考虑子空间 $\{\boldsymbol{U}, \boldsymbol{\pi}(n)\}$ 的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_{U,\pi}(n)$ 与子空间 $\{\boldsymbol{U}\}$ 的投影矩阵 $\boldsymbol{P}_U(n)$ 之间的关系，则有 [12]

$$\boldsymbol{P}_{U,\pi}(n) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{P}_U(n-1) & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & 1 \end{bmatrix} \tag{10.5.23}$$

$$\boldsymbol{P}_{U,\pi}^{\perp}(n) = \begin{bmatrix} \boldsymbol{P}_U^{\perp}(n-1) & \boldsymbol{0} \\ \boldsymbol{0} & 0 \end{bmatrix} \tag{10.5.24}$$

在式 (10.4.10) 中令 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{y} = z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n)$, $\boldsymbol{U} = \boldsymbol{X}_{1,m}(n)$, $\boldsymbol{u} = \boldsymbol{\pi}(n)$，则可证明偏相关系数满足下列更新关系：

$$\Delta_{m+1}(n) = \Delta_{m+1}(n-1) + \frac{\epsilon_m^{\rm f}(n)\epsilon_m^{\rm b}(n-1)}{\gamma_m(n-1)} \tag{10.5.25}$$

式中，$\gamma_m(n-1)$ 为角度参数，定义为

$$\gamma_m(n-1) \stackrel{\rm def}{=} \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{\pi}(n)\rangle \tag{10.5.26}$$

在式 (10.4.10) 中令 $\boldsymbol{z} = \boldsymbol{y} = \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{U} = \boldsymbol{X}_{1,m}(n)$ 和 $\boldsymbol{u} = z^{-m-1}\boldsymbol{x}(n)$，则最后可得到角度参数的更新公式：

$$\gamma_{m+1}(n-1) = \gamma_m(n-1) - \frac{[e_m^{\rm b}(n-1)]^2}{\epsilon_m^{\rm b}(n-1)} \tag{10.5.27}$$

综合以上各种更新公式，就得到了格型自适应滤波算法。

算法 10.5.1 (格型自适应滤波算法)

初始化

$$e_m^{\rm b}(0)=e_m^{\rm f}(0)=\Delta_m(0)=0$$
$$\gamma_m(0)=1$$
$$\epsilon_m^{\rm f}(0)=\epsilon_m^{\rm b}(0)=\delta$$

对 $n=1,2,\cdots$，计算

$$e_0^{\rm b}(n)=e_0^{\rm f}(n)=x(n)$$
$$\epsilon_0^{\rm b}(n)=\epsilon_0^{\rm f}(n)=\epsilon_0^{\rm f}(n-1)+x^2(n)$$
$$\gamma_0(n)=1$$

对 $m=0,1,\cdots,M-1$ 计算

$$\Delta_{m+1}(n)=\Delta_{m+1}(n-1)+\frac{\epsilon_m^{\rm f}(n)\epsilon_m^{\rm b}(n-1)}{\gamma_m(n-1)}$$

$$e_{m+1}^{\rm f}(n)=e_m^{\rm f}(n)-\frac{\Delta_{m+1}(n-1)e_m^{\rm b}(n-1)}{\epsilon_m^{\rm b}(n-1)}$$

$$e_{m+1}^{\rm b}(n)=e_m^{\rm b}(n-1)-\frac{\Delta_{m+1}(n-1)e_m^{\rm f}(n)}{\epsilon_m^{\rm f}(n)}$$

$$\epsilon_{m+1}^{\rm f}(n)=\epsilon_m^{\rm f}(n)-\frac{\Delta_{m+1}^2(n)}{\epsilon_m^{\rm b}(n-1)}$$

$$\epsilon_{m+1}^{\rm b}(n)=\epsilon_m^{\rm b}(n-1)-\frac{\Delta_{m+1}^2(n)}{\epsilon_m^{\rm f}(n)}$$

$$\gamma_{m+1}(n-1)=\gamma_m(n-1)-\frac{[e_m^{\rm b}(n-1)]^2}{e_m^{\rm b}(n-1)}$$

其中，参数 δ 应选择接近稳态预测误差的平方值。

我们看到，利用投影矩阵和正交投影矩阵的更新公式，大大方便了格型自适应滤波器的设计。如果没有投影矩阵和正交投影矩阵这样有力的数学工具，要解决格型自适应滤波器设计这一复杂问题即使不是不可能的，至少也是非常繁杂的！

10.6 满列秩矩阵的斜投影算子

前面几节详细讨论了正交投影算子的理论与应用。概括起来，向量 z 到子空间 H 的正交投影可以分解为该向量分别到子空间 H_1 和 H_2 的正交投影之和。其中，子空间 H_2 要求是 H_1 的正交补，并且正交投影算子本身必须同时是幂等的和复共轭对称的。本节讨论子空间 H_2 不是 H_1 的正交补的情况下的投影，从中引出一种不具有复共轭对称性的幂等算子。这类算子统称为斜投影算子 (oblique projector)。

斜投影算子最早是在 20 世纪 30 年代由 Murray [326] 和 Lorch [285] 提出并讨论的。后来，Afriat [10]，Lyantse [291]，Rao 与 Mitra [383]，Halmos [200]，Kato [247] 以及 Takeuchi

等人 [440] 从数学角度作了进一步的论述与介绍。1989 年，Kayalar 与 Weinert [250] 提出在阵列信号处理中使用斜投影算子，并且推导出了计算斜投影算子的一些新的公式和迭代算法。1994 年，Behrent 与 Scharf [34] 针对到矩阵的列空间的斜投影算子，推导了更加实际的计算公式。2000 年，Vandaele 和 Moonen [465] 利用矩阵的 LQ 分解，给出了到矩阵的行空间的斜投影公式。

由于斜投影算子的广泛应用，本节和 10.7 节将分别就满列秩和满行秩矩阵，系统地讨论斜投影算子的有关理论和方法。至于斜投影算子的典型应用举例，则留待在 10.8 节介绍。

10.6.1 斜投影算子的定义

令 V 是一 Hilbert 空间，H 是 V 中由观测数据张成的一个闭合子空间。假定数据分成两个子集，这两个子集张成两个闭合的子空间 H_1 和 H_2，并且满足 $H = H_1 + H_2$，其中，H_1 和 H_2 的交集 $H_1 \cap H_2 = \{0\}$，即子空间 H_1 和 H_2 是无重叠的 (nonoverlapping) 或无交连的 (disjoint)。注意，两个子空间无交连只是表明它们之间没有共同的元素，并不意味这两个子空间正交。正交是比无交连更强的条件：若两个子空间正交，则它们一定是无交连的。

令 $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{P}_1, \boldsymbol{P}_2$ 分别是到子空间 H, H_1, H_2 上的正交投影算子。对向量 $\boldsymbol{z} \in V$，现在希望计算它在子空间 H 上的正交投影 $\boldsymbol{Pz}$。Aronszajn [21] 提出，可以先分别求出向量 $\boldsymbol{z}$ 到子空间 H_1 和 H_2 的正交投影 $\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{z}$ 和 $\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{z}$，然后再按照综合公式

$$\boldsymbol{Pz} = (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_2)(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_1\boldsymbol{P}_2)^{-1}\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{z} + (\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_1)(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1)^{-1}\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{z} \tag{10.6.1}$$

得到 $\boldsymbol{Pz}$。

上述 Aronszajn 综合公式可以直接解决某些统计内插问题 [8],[358],[399]，并且正如文献 [250] 所指出的那样，所有双滤波器平滑公式都是 Aronszajn 综合公式的特例。

应当指出，当子空间 H_2 是 H_1 的正交补时，正交投影算子 $\boldsymbol{P}_2 = \boldsymbol{P}_1^{\perp}$ 或 $\boldsymbol{P}_1 = \boldsymbol{P}_2^{\perp}$。此时，Aronszajn 综合公式 (10.6.1) 简化为

$$\boldsymbol{Pz} = \boldsymbol{P}_1\boldsymbol{z} + \boldsymbol{P}_1^{\perp}\boldsymbol{z} = \boldsymbol{P}_2\boldsymbol{z} + \boldsymbol{P}_2^{\perp}\boldsymbol{z} \tag{10.6.2}$$

即为典型的正交分解。因此，Aronszajn 综合公式是正交分解的推广。

Aronsajn 综合方法利用两个非正交的子空间的正交投影算子 $\boldsymbol{P}_1$ 和 $\boldsymbol{P}_2$ 计算正交投影 $\boldsymbol{Pz}$。这一方法存在以下两个缺点：

(1) 需要比较大的计算量。

(2) 不容易推广到子空间 H 分解为三个或者多个子空间的情况。

Aronszajn 综合方法的这两个固有缺点可以通过计算非正交投影加以避免。这种非正交的投影就是下面将介绍的斜投影。

欲使正交投影 $\boldsymbol{Pz}$ 的计算变得尽可能简单，最简便的方法莫过于使 $\boldsymbol{Pz}$ 是向量 $\boldsymbol{z}$ 到子空间 H_1 和 H_2 的两个投影的直和，即

$$\boldsymbol{Pz} = \boldsymbol{E}_1\boldsymbol{z} + \boldsymbol{E}_2\boldsymbol{z} \tag{10.6.3}$$

虽然仍然是综合正交投影 $\boldsymbol{P z}$，但是与 Aronszajn 综合公式 (10.6.1) 不同，式 (10.6.3) 中的投影 $\boldsymbol{E}_1\boldsymbol{z}$ 及 $\boldsymbol{E}_2\boldsymbol{z}$ 只是分别位于子空间 H_1 和 H_2，而不再是向量 $\boldsymbol{z}$ 分别到子空间 H_1 和 H_2 的正交投影。此时，称

$$H = H_1 \oplus H_2 \tag{10.6.4}$$

是子空间 H 的直和分解 (direct sum decomposition)。注意，算子 $\boldsymbol{E}_1$ 和 $\boldsymbol{E}_2$ 不再是正交投影算子。为了便于区别，下面将统一使用符号 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{E}$ 分别表示正交投影算子和非正交投影算子。非正交投影算子统称斜投影算子。

应当注意，无论是正交投影算子，还是斜投影算子，都必须满足任何一个投影算子所必须具有的幂等性。容易验证，Aronszajn 综合公式 (10.6.1) 中的 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_2)(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{P}_2)^{-1}\boldsymbol{P}_1$ 和 $(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_1)(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1)^{-1}\boldsymbol{P}_2$ 都不是斜投影算子，因为它们都不是幂等算子。

那么，如何构造式 (10.6.3) 中的两个斜投影算子 $\boldsymbol{E}_1$ 和 $\boldsymbol{E}_2$ 呢? 下面以满列秩矩阵作为讨论对象。

令 $n\times m$ 矩阵 $\boldsymbol{H}$ 是一个满列秩矩阵，其值域 (空间) 为

$$\text{Range}(\boldsymbol{H}) = \{\boldsymbol{y}\in C^m:\ \boldsymbol{y}=\boldsymbol{H}\boldsymbol{x},\ \boldsymbol{x}\in C^n\} \tag{10.6.5}$$

并且

$$\text{Null}(\boldsymbol{H}) = \{\boldsymbol{x}\in C^n:\ \boldsymbol{H}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{0}\} \tag{10.6.6}$$

是 $\boldsymbol{H}$ 的零空间。

现在考虑 $n\times m$ 满列秩矩阵 $\boldsymbol{H}$ 和 $n\times k$ 满列秩矩阵 $\boldsymbol{S}$ 组合成一个 $n\times(m+k)$ 矩阵 $[\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}]$，其中，$m+k<n$，使得矩阵 $[\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}]$ 的列秩小于行数 n，并且 $\boldsymbol{H}$ 的列向量与 $\boldsymbol{S}$ 的列向量线性无关。由于 $\boldsymbol{H}$ 的列向量与 $\boldsymbol{S}$ 的列向量线性无关，所以两个值域 Range($\boldsymbol{H}$) 和 Range($\boldsymbol{S}$) 是无交连的。

根据投影矩阵的定义，到值域空间 Range($\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}$) 的正交投影算子为

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_{HS} &= [\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}]\langle[\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}],[\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}]\rangle^{-1}[\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}]^{\mathrm{H}}\\ &= [\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}\\ \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{10.6.7}$$

式中，Hermitian 矩阵 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{U\Sigma U}^{\mathrm{H}}$ 的逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{-1}=\boldsymbol{U\Sigma}^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{H}}$，其中，$\boldsymbol{\Sigma}^{-1}$ 表示对角矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}$ 的逆矩阵，即非零对角元素取其倒数，零元素仍然取零。

式 (10.6.7) 表明，正交投影算子 $\boldsymbol{P}_{HS}$ 可以分解为 [34]

$$\boldsymbol{P}_{HS} = \boldsymbol{E}_{H|S} + \boldsymbol{E}_{S|H} \tag{10.6.8}$$

式中

$$\boldsymbol{E}_{H|S} = [\boldsymbol{H},\boldsymbol{O}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}\\ \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix} \tag{10.6.9}$$

$$\boldsymbol{E}_{S|H} = [\boldsymbol{O},\boldsymbol{S}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}\\ \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix} \tag{10.6.10}$$

这里，$\boldsymbol{O}$ 代表零矩阵。

利用第 1 章的分块矩阵求逆引理公式 (1.7.19)，易求得

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{A}^{-1} &= \begin{bmatrix} \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S} \\ \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S} \end{bmatrix}^{-1} \\
&= \begin{bmatrix} (\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1} & -(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S})^{-1} \\ -(\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_H^{\perp}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H})^{-1} & (\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_H^{\perp}\boldsymbol{S})^{-1} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{10.6.11}
$$

式中

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{P}_S^{\perp} &= \boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_S = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}} \\
\boldsymbol{P}_H^{\perp} &= \boldsymbol{I} - \boldsymbol{P}_H = \boldsymbol{I} - \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}
\end{aligned}
$$

将式 (10.6.11) 代入式 (10.6.9)，立即得到

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{E}_{H|S} &= [\boldsymbol{H}, \boldsymbol{O}] \begin{bmatrix} (\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1} & -(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S})^{-1} \\ -(\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_H^{\perp}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H})^{-1} & (\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_H^{\perp}\boldsymbol{S})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \\ \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}} \end{bmatrix} \\
&= \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} - \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S
\end{aligned}
$$

整理后，得到

$$
\boldsymbol{E}_{H|S} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp} \tag{10.6.12}
$$

类似地，将式 (10.6.11) 代入式 (10.6.10)，又可得到

$$
\boldsymbol{E}_{S|H} = \boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_H^{\perp}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_H^{\perp} \tag{10.6.13}
$$

公式 (10.6.12) 和公式 (10.6.13) 是 Behrent 与 Scharf 于 1994 年得到的 [34]。

10.6.2 斜投影算子的性质

算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 具有以下重要性质 [34]。

性质 1 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 均为幂等算子，即有

$$
\boldsymbol{E}_{H|S}^2 = \boldsymbol{E}_{H|S} \quad \text{和} \quad \boldsymbol{E}_{S|H}^2 = \boldsymbol{E}_{S|H} \tag{10.6.14}
$$

证明 由式 (10.6.12) 易知

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{E}_{H|S}^2 &= \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp} \\
&= \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp} \\
&= \boldsymbol{E}_{H|S}
\end{aligned}
$$

类似地，利用式 (10.6.13)，又容易证明 $\boldsymbol{E}_{S|H}^2 = \boldsymbol{E}_{S|H}$。 ■

这个性质表明，算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 分别是幂等算子，所以它们都是投影算子。

观察式 (10.6.12) 和式 (10.6.13) 知，幂等算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 都不是复共轭对称即 Hermitian 的，所以它们虽然是投影算子，但不是正交投影算子。

定义 10.6.1 一个不具有复共轭对称性的幂等算子 $\boldsymbol{E}$ 称为斜投影算子。

根据定义，由式 (10.6.12) 定义的算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和由式 (10.6.13) 定义的算子 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 今后称为斜投影算子。

性质 2 $[\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}]$ 到 $\text{Range}([\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}])$ 的斜投影

$$\boldsymbol{E}_{H|S}[\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}]=[\boldsymbol{H},\boldsymbol{O}] \tag{10.6.15}$$

$$\boldsymbol{E}_{S|H}[\boldsymbol{H},\boldsymbol{S}]=[\boldsymbol{O},\boldsymbol{S}] \tag{10.6.16}$$

或等价为

$$\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H} \quad \text{和} \quad \boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{O} \tag{10.6.17}$$

$$\boldsymbol{E}_{S|H}\boldsymbol{H}=\boldsymbol{O} \quad \text{和} \quad \boldsymbol{E}_{S|H}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{S} \tag{10.6.18}$$

证明 由式 (10.6.12) 立即知

$$\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}$$

和

$$\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{O}$$

因为 $\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{O}$。这就证明了式 (10.6.17)。类似地，可以证明式 (10.6.18)。 ■

式 (10.6.17) 和式 (10.6.18) 分别表明：

(1) $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 的值域是 $\text{Range}(\boldsymbol{H})$，而 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 的零空间包含 $\text{Range}(\boldsymbol{S})$，即有

$$\text{Range}(\boldsymbol{E}_{H|S})=\text{Range}(\boldsymbol{H}), \qquad \text{Range}(\boldsymbol{S})\subset\text{Null}(\boldsymbol{E}_{H|S}) \tag{10.6.19}$$

(2) $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 的值域是 $\text{Range}(\boldsymbol{S})$，而 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 的零空间包含 $\text{Range}(\boldsymbol{H})$，即有

$$\text{Range}(\boldsymbol{E}_{S|H})=\text{Range}(\boldsymbol{S}), \qquad \text{Range}(\boldsymbol{H})\subset\text{Null}(\boldsymbol{E}_{S|H}) \tag{10.6.20}$$

换言之，斜投影算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 的值域在 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 的零空间内，而 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 的值域则在 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 的零空间内。

斜投影算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 读作"沿着与子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{S})$ 平行的方向，到子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{H})$ 上的投影算子"。类似地，斜投影算子 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 则读作"沿着与子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{H})$ 平行的方向，到子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{S})$ 上的投影算子"。这一称呼给出了性质 2 的几何解释。以斜投影算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 为例，其投影方向与子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{S})$ 平行，故投影算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 的子空间与子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{S})$ 不可能有任何交连。由于 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{H}$ 是 $\boldsymbol{H}$ 沿着与子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{S})$ 平行的方向，到子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{H})$ 上的投影，而 $\boldsymbol{H}$ 本身位于子空间 $\text{Range}(\boldsymbol{H})$，所以斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{H}$ 的结果为 $\boldsymbol{H}$，即 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{H}=\boldsymbol{H}$。

性质 3 斜投影算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 的交叉项为零，即有

$$\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{E}_{S|H}=\boldsymbol{O}, \qquad \boldsymbol{E}_{S|H}\boldsymbol{E}_{H|S}=\boldsymbol{O} \tag{10.6.21}$$

证明 由式 (10.6.12) 和式 (10.6.13) 易知

$$\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{E}_{S|H}=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\cdot\boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_H^{\perp}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_H^{\perp}=\boldsymbol{O}$$

因为 $\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{O}$。类似地，可以证明 $\boldsymbol{E}_{S|H}\boldsymbol{E}_{H|S}=\boldsymbol{O}$，因为 $\boldsymbol{P}_H^{\perp}\boldsymbol{H}=\boldsymbol{O}$。 ■

由于斜投影算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 的交叉项为零，故它们的值域空间 Range($\boldsymbol{E}_{H|S}$) 和 Range($\boldsymbol{E}_{S|H}$) 是无交连的。注意，两个子空间无交连，并不意味着这两个子空间正交。无交连是比正交更弱的条件：正交的子空间一定是无交连的，但无交连的子空间不一定正交。

性质 4　斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 后，再向子空间 Range($\boldsymbol{H}$) 上投影，得到的结果与原斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 完全相同，即

$$\boldsymbol{E}_{H|S}=\boldsymbol{P}_H\boldsymbol{E}_{H|S} \tag{10.6.22}$$

类似地，有

$$\boldsymbol{E}_{S|H}=\boldsymbol{P}_S\boldsymbol{E}_{S|H} \tag{10.6.23}$$

证明　由正交投影算子的定义及式 (10.6.12)，易知

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_H\boldsymbol{E}_{H|S}&=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\\&=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\\&=\boldsymbol{E}_{H|S}\end{aligned}$$

类似地，可证明式 (10.6.23)。 ■

这一性质也是性质 2 的体现，与斜投影算子的几何解释吻合：斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 是沿着与子空间 Range($\boldsymbol{S}$) 平行的方向，到子空间 Range($\boldsymbol{H}$) 上的投影，即有 Range($\boldsymbol{E}_{H|S}$) = Range($\boldsymbol{H}$)。因此，斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 再向子空间 Range($\boldsymbol{H}$)，其结果将不会发生任何变化。

性质 5　广义逆矩阵与斜投影的乘积

$$\boldsymbol{H}^{\dagger}\boldsymbol{E}_{H|S}=(\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{\dagger},\qquad \boldsymbol{S}^{\dagger}\boldsymbol{E}_{S|H}=(\boldsymbol{P}_H^{\perp}\boldsymbol{S})^{\dagger} \tag{10.6.24}$$

式中，$\boldsymbol{B}^{\dagger}=(\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{B})^{-1}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}$ 表示矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的广义逆矩阵。

证明　首先，由正交投影算子的幂等性及 Hermitian 性，有

$$(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}=[\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{P}_S^{\perp})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H}]^{-1}=[(\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H}]^{-1} \tag{10.6.25}$$

利用式 (10.6.25) 易得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{H}^{\dagger}\boldsymbol{E}_{H|S}&=(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\cdot\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\\&=[(\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H}]^{-1}(\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{\mathrm{H}}\\&=(\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{\dagger}\end{aligned}$$

式 (10.6.24) 中的第二个公式可类似证明。 ■

性质 6　正交投影与斜投影的乘积

$$\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{P}_S^{\perp}=\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}=\boldsymbol{P}_{\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H}} \tag{10.6.26}$$

证明　利用式 (10.6.12)，立即有

$$\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{P}_S^{\perp}=\boldsymbol{P}_S^{\perp}\cdot\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{P}_S^{\perp} \tag{10.6.27}$$

利用正交投影算子 $\boldsymbol{P}_S^\perp$ 的幂等性和式 (10.6.25)，可将式 (10.6.27) 写为

$$\boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{E}_{H|S} \boldsymbol{P}_S^\perp = \boldsymbol{P}_S^\perp \cdot \boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{H}[(\boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{H})^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{H}]^{-1} (\boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{H})^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_S^\perp = \boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{H}} \boldsymbol{P}_S^\perp$$

类似地，又可将式 (10.6.27) 简化为

$$\boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{E}_{H|S} \boldsymbol{P}_S^\perp = \boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{H} (\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{H})^{-1} \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_S^\perp = \boldsymbol{P}_{\boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{H}}$$

这就证明了式 (10.6.26)。 ■

性质 5 和性质 6 可视为斜投影算子与正交投影算子之间的关系。

性质 7 若子空间 Range($\boldsymbol{H}$) 与 Range($\boldsymbol{S}$) 正交，即 Range($\boldsymbol{H}$) $\perp$ Range($\boldsymbol{S}$)，则斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 分别简化为正交投影 $\boldsymbol{P}_H$ 和 $\boldsymbol{P}_H^\perp$，即

$$\boldsymbol{E}_{H|S} = \boldsymbol{P}_H, \qquad \boldsymbol{E}_{S|H} = \boldsymbol{P}_H^\perp \tag{10.6.28}$$

证明 当子空间 Range($\boldsymbol{H}$) 与 Range($\boldsymbol{S}$) 正交时，它们的正交投影算子满足 $\boldsymbol{P}_S = \boldsymbol{P}_H^\perp$ 和 $\boldsymbol{P}_S^\perp = \boldsymbol{P}_H$ 之关系。于是，有

$$\boldsymbol{E}_{H|S} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_S^\perp \boldsymbol{H})^{-1} \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_S^\perp = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_H \boldsymbol{H})^{-1} \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_H \tag{10.6.29}$$

另一方面，根据正交投影算子的定义，容易验证 $\boldsymbol{P}_H \boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}$。利用正交投影算子的 Hermitian 性 $\boldsymbol{P}_H^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}_H$，又有 $\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_H = (\boldsymbol{P}_H \boldsymbol{H})^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}$。将 $\boldsymbol{P}_H \boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}$ 和 $\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{P}_H = \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}$ 代入式 (10.6.29)，则

$$\boldsymbol{E}_{H|S} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} \boldsymbol{H})^{-1} \boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{P}_H$$

类似地，有

$$\boldsymbol{E}_{S|H} = \boldsymbol{P}_S = \boldsymbol{P}_H^\perp$$

即式 (10.6.28) 得证。 ■

性质 7 表明，斜投影算子是正交投影算子的扩展，而正交投影算子则是斜投影算子的一个特例。为了方便读者使用，现将斜投影算子的性质汇总于下 [34]：

(1) $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 均为幂等算子，即有

$$\boldsymbol{E}_{H|S}^2 = \boldsymbol{E}_{H|S}, \qquad \boldsymbol{E}_{S|H}^2 = \boldsymbol{E}_{S|H}$$

(2) $\boldsymbol{E}_{H|S}[\boldsymbol{H}, \boldsymbol{S}] = [\boldsymbol{H}, \boldsymbol{O}]$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}[\boldsymbol{H}, \boldsymbol{S}] = [\boldsymbol{O}, \boldsymbol{S}]$，或者等价为

$$\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}, \qquad \boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{O}$$
$$\boldsymbol{E}_{S|H}\boldsymbol{H} = \boldsymbol{O}, \qquad \boldsymbol{E}_{S|H}\boldsymbol{S} = \boldsymbol{S}$$

(3) 斜投影算子 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 和 $\boldsymbol{E}_{S|H}$ 的交叉项为零，即有

$$\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{E}_{S|H} = \boldsymbol{O}, \qquad \boldsymbol{E}_{S|H}\boldsymbol{E}_{H|S} = \boldsymbol{O}$$

(4) 斜投影后，再正交投影，不会改变原斜投影：

$$E_{H|S}=P_H E_{H|S},\qquad E_{S|H}=P_S E_{S|H}$$

(5) 令 $B^\dagger=(B^{\rm H}B)^{-1}B^{\rm H}$ 表示矩阵 B 的广义逆矩阵，则

$$H^\dagger E_{H|S}=(P_S^\perp H)^\dagger,\qquad S^\dagger E_{S|H}=(P_H^\perp S)^\dagger$$

(6) 斜投影矩阵与正交投影矩阵的关系：

$$P_S^\perp E_{H|S}P_S^\perp=P_S^\perp P_{P_S^\perp H}P_S^\perp=P_{P_S^\perp H}$$

(7) 若子空间 Range(H) 与 Range(S) 正交，即 Range(H) $\perp$ Range(S)，则

$$E_{H|S}=P_H,\qquad E_{S|H}=P_H^\perp$$

10.6.3 斜投影算子的几何解释

总结以上讨论，可以得到三个投影算子各自的涵义如下：

(1) 正交投影算子 P_{HS} 是到合成矩阵 $[H,S]$ 的列向量张成的值域空间 Range(H,S) 上的正交投影算子。

(2) 斜投影算子 $E_{H|S}$ 是沿着值域空间 Range(S)，到另一值域空间 Range(H) 的投影算子。

(3) 斜投影算子 $E_{S|H}$ 是沿着值域空间 Range(H)，到值域空间 Range(S) 的投影算子。

前面已经解释过，斜投影算子 $E_{H|S}$ 的值域是 Range(H)，其零空间包含 Range(S)。为了完整地表达斜投影算子 $E_{H|S}$ 的零空间，定义矩阵 A 是合成矩阵 $[H,S]$ 的正交矩阵，即有

$$[H,S]^{\rm H}A=O$$

从而有

$$H^{\rm H}A=O,\qquad S^{\rm H}A=O \tag{10.6.30}$$

第二式左乘满列秩矩阵 $S(S^{\rm H}S)^{-1}$，即可将 $S^{\rm H}A=O$ 等价写作

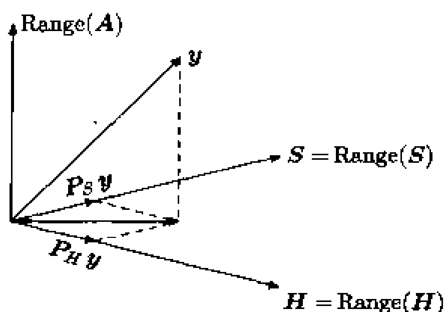
$$P_S A=O\Rightarrow P_S^\perp A=A \tag{10.6.31}$$

利用这些结果，由式 (10.6.12) 得

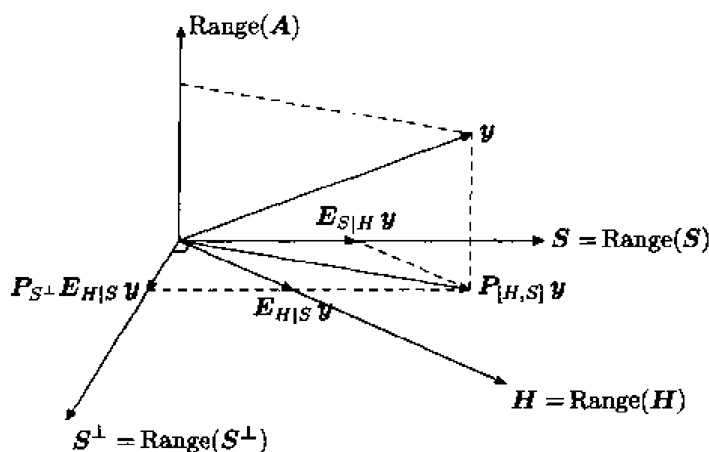
$$\begin{aligned}E_{H|S}A&=H(H^{\rm H}P_S^\perp H)^{-1}H^{\rm H}P_S^\perp A\\&=H(H^{\rm H}P_S^\perp H)^{-1}H^{\rm H}A=O\end{aligned}$$

这说明，矩阵 A 的列张成的值域子空间 Range(A) 也在斜投影算子 $E_{H|S}$ 的零空间内，即 Range(A) $\subset$ Null($E_{H|S}$)。

式 (10.6.30) 表明，值域子空间 Range($\boldsymbol{A}$) 既与值域 Range($\boldsymbol{H}$) 正交，又与子空间 Range($\boldsymbol{S}$) 正交。于是，可以利用三个空间方向 Range($\boldsymbol{H}$), Range($\boldsymbol{S}$) 和 Range($\boldsymbol{A}$) 作为由 $n \times (m+k)$ 矩阵 $[\boldsymbol{H}, \boldsymbol{S}]$ 的列向量张成的 Euclidean 空间 $\mathcal{C}^{m+k}$ 的坐标轴，如图 10.6.1 所示。



(a) 正交投影的几何解释



(b) 斜投影的几何解释

图 10.6.1 正交投影与斜投影

图 10.6.1 中，坐标轴 Range($\boldsymbol{A}$) 与另外两个坐标轴 Range($\boldsymbol{H}$), Range($\boldsymbol{S}$) 垂直，但水平面上的坐标轴 Range($\boldsymbol{H}$) 和 Range($\boldsymbol{S}$) 不相互垂直。换句话说，Euclidean 空间可以分解为三个方向的直和：

$$\mathcal{C}^{m+k} = \text{Range}(\boldsymbol{H}) \oplus \text{Range}(\boldsymbol{S}) \oplus \text{Range}(\boldsymbol{A}) \tag{10.6.32}$$

图 10.6.1 (a) 所示的正交投影已经在前面解说过，现对图 10.6.1 (b) 所示的斜投影解释如下：当向量 $\boldsymbol{y}$ 位于两个坐标轴 Range($\boldsymbol{H}$) 和 Range($\boldsymbol{S}$) 组成的水平面上时，向量 $\boldsymbol{y}$ 沿着与 Range($\boldsymbol{S}$) 平行的方向，到 Range($\boldsymbol{H}$) 的斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}$ 满足以下两个条件：

(1) 斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}$ 位于坐标轴 Range($\boldsymbol{H}$) 上，即 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y} \in \text{Range}(\boldsymbol{H})$；

(2) 斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}$ 的端点到向量 $\boldsymbol{y}$ 的端点之间的连线与坐标轴 Range($\boldsymbol{S}$) 平行，即 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y} \notin \text{Range}(\boldsymbol{S})$。

如图 10.6.1 (b) 所示，对于 Euclidean 空间中的向量 $\boldsymbol{y}$ 而言，斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}$ 的构造分为以下两个步骤：

(1) 向量 $\boldsymbol{y}$ 先正交投影到坐标轴 Range($\boldsymbol{H}$) 和 Range($\boldsymbol{S}$) 组成的平面上，即投影 $\boldsymbol{P}_{HS}\boldsymbol{y}$ 是向量 $\boldsymbol{y}$ 在矩阵 $[\boldsymbol{H}, \boldsymbol{S}]$ 的列张成的值域 Range($\boldsymbol{H}, \boldsymbol{S}$) 上的正交投影，记作 $\boldsymbol{y}_{HS} = \boldsymbol{P}_{HS}\boldsymbol{y}$。

(2) 利用图 10.6.1 (a) 的方法，求正交投影 $\boldsymbol{y}_{HS}$ 沿着与值域 Range($\boldsymbol{S}$) 平行的方向，到值域 Range($\boldsymbol{H}$) 的斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}_{HS}$。

于是，向量 $\boldsymbol{y}$ 的斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}$ 由 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y} = \boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}_{HS}$ 给出。

斜投影算子的物理涵义是：向量 $\boldsymbol{y}$ 的斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}$ 是向量 $\boldsymbol{y}$ 沿着值域 Range($\boldsymbol{S}$) 的方向，到值域 Range($\boldsymbol{H}$) 的投影。翻译成信号处理的语言，即是“斜投影 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}$ 抽取向量 $\boldsymbol{y}$ 在特定方向 (值域 Range($\boldsymbol{H}$)) 的分量，并完全对消掉向量 $\boldsymbol{y}$ 在另一个方向 (值域 Range($\boldsymbol{S}$)) 的所有分量”。

从图 10.6.1 还可看出，投影 $\boldsymbol{P}_A\boldsymbol{y}$ 是向量 $\boldsymbol{y}$ 到值域 Range($\boldsymbol{A}$) 的正交投影。其中，投影 $\boldsymbol{P}_A\boldsymbol{y}$ 不仅与 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}$ 正交，而且也与 $\boldsymbol{E}_{S|H}\boldsymbol{y}$ 正交，即有 $\boldsymbol{P}_A\boldsymbol{y} \perp \boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y}$ 和 $\boldsymbol{P}_A\boldsymbol{y} \perp \boldsymbol{E}_{S|H}\boldsymbol{y}$。

10.6.4 主角与斜投影矩阵的关系

在 9.1 节中定义了两个子空间之间的主角。下面的引理描述了两个值域空间的主角与斜投影矩阵之间的关系。

引理 10.6.1 [34] 假设斜投影矩阵 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 的第 i 个奇异值为 σ_i，并且子空间 Range($\boldsymbol{H}$) 和 Range($\boldsymbol{S}$) 之间的第 i 个主角为 ϕ_i，则

$$\sigma_i = \frac{1}{\sin(\phi_i)} \tag{10.6.33}$$

证明 [34] 由于 λ_i 是乘积矩阵 $\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_S$ 的奇异值，所以 λ_i^2 是 $\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_S\boldsymbol{U}_S^{\mathrm{H}}\boldsymbol{U}_H$ 的特征值。由式 (9.2.24) 知

$$\begin{array}{llll} & \cos^2\phi_i & \text{是} & \boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S\boldsymbol{U}_H & \text{的一个特征值} \\ \Rightarrow & 1-\cos^2\phi_i & \text{是} & \boldsymbol{I}-\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S\boldsymbol{U}_H & \text{的一个特征值} \\ \Rightarrow & \sin^2\phi_i & \text{是} & \boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{I}-\boldsymbol{P}_S)\boldsymbol{U}_H & \text{的一个特征值} \\ \Rightarrow & \dfrac{1}{\sin^2\phi_i} & \text{是} & (\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{U}_H)^{-1} & \text{的一个特征值} \end{array}$$

由于特征值相对于正交变换具有不变性，最后的等式意味着

$$\frac{1}{\sin^2\phi_i} \quad \text{是} \quad \boldsymbol{U}_H(\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{U}_H)^{-1}\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}} \quad \text{的一个特征值} \tag{10.6.34}$$

另外，由于 $\boldsymbol{U}_H$ 张成值域子空间 Range($\boldsymbol{H}$)，即 Span($\boldsymbol{U}_H$) = Range($\boldsymbol{H}$)，故式 (10.6.12) 可以等效写作

$$\boldsymbol{E}_{H|S} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp} = \boldsymbol{U}_H(\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{U}_H)^{-1}\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}$$

从而得

$$\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{E}_{H|S}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}} = \boldsymbol{U}_H(\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{U}_H)^{-1}\boldsymbol{U}_H^{\mathrm{H}}$$

将这一结果代入式 (10.6.34)，即知 $1/(\sin^2\phi_i)$ 是 $\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{E}_{H|S}^{\mathrm{H}}$ 的特征值。就是说，$1/\sin\phi_i$ 是 $\boldsymbol{E}_{H|S}$ 的奇异值。 ■

10.6.5 多个子空间的斜投影算子

前面讨论了两个子空间的斜投影算子，现在考察多个子空间的情况。假定向量空间 V 可以分解为 p 个无交连的子空间 V_i，即 V 是 p 个子空间的直和分解：

$$V = V_1 \oplus V_2 \oplus \cdots \oplus V_p \tag{10.6.35}$$

因此，向量空间 V 内的任意一个向量 $\boldsymbol{x}$ 可以唯一表示为

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2 + \cdots + \boldsymbol{x}_p \tag{10.6.36}$$

式中，$\boldsymbol{x}_i \in V_i,\ i = 1,2,\cdots,p$。问题是如何确定 $\boldsymbol{x}_i,\ i = 1,2,\cdots,p$。

令 $V_{\{i\}}$ 表示 V 空间中除子空间 V_i 之外的其他 $p-1$ 个子空间的直和，即

$$V_{\{i\}} = V_1 \oplus \cdots \oplus V_{i-1} \oplus V_{i+1} \oplus \cdots \oplus V_p \tag{10.6.37}$$

于是，子空间 V_i 的零空间由与 V_i 无交连的 $V_{\{i\}}$ 与 V 空间的正交补 $V^{\perp}$ 的直和组成，即为 $V_{\{i\}} \oplus V^{\perp}$。显然，向量 $\boldsymbol{x}$ 变换为 $\boldsymbol{x}_i \in V_i$ 的映射决定了唯一的线性幂等算子

$$\boldsymbol{E}_i : \boldsymbol{x} \to \boldsymbol{x}_i \tag{10.6.38}$$

称之为沿着零子空间 $V_{\{i\}} \oplus V^{\perp}$ 到值域子空间 $V_i = \mathrm{Range}(\boldsymbol{E}_i)$ 的斜投影算子。因此，有

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{E}_1\boldsymbol{x} + \boldsymbol{E}_2\boldsymbol{x} + \cdots + \boldsymbol{E}_p\boldsymbol{x} \tag{10.6.39}$$

由于 $\boldsymbol{E}_i$ 的值域 V_i 与零空间 $V_{\{i\}} \oplus V^{\perp}$ 无交连，所以斜投影算子的交义项全部等于零，即

$$\boldsymbol{E}_i\boldsymbol{E}_j = \boldsymbol{O}, \quad i \neq j \tag{10.6.40}$$

另一方面，由

$$\boldsymbol{x} = \boldsymbol{x}_1 + \boldsymbol{x}_2 + \cdots + \boldsymbol{x}_p = \boldsymbol{E}_1\boldsymbol{x} + \boldsymbol{E}_2\boldsymbol{x} + \cdots + \boldsymbol{E}_p\boldsymbol{x} = \sum_{i=1}^{p}\boldsymbol{E}_i\boldsymbol{x}$$

立即知，斜投影算子 $\boldsymbol{E}_1, \boldsymbol{E}_2, \cdots, \boldsymbol{E}_p$ 必然满足以下关系：

$$\sum_{i=1}^{p}\boldsymbol{E}_i = \boldsymbol{I} \tag{10.6.41}$$

总结以上讨论，可以得到多个子空间的斜投影算子具有的性质：

$$\text{Range}(\boldsymbol{E}_i) = V_i \tag{10.6.42}$$

$$\boldsymbol{E}_i\boldsymbol{E}_j = \boldsymbol{E}_j\boldsymbol{E}_i = \boldsymbol{O}, \quad i \neq j \tag{10.6.43}$$

$$\sum_{i=1}^{p} \boldsymbol{E}_i = \boldsymbol{I} \tag{10.6.44}$$

下面分析多个子空间的斜投影算子与正交投影算子之间的关系。

令 $\boldsymbol{P}$ 和 $\boldsymbol{P}_i$ 分别是到子空间 H 和 H_i 的正交投影算子，而

$$\boldsymbol{\Pi} = \boldsymbol{P} - \boldsymbol{P}_i \tag{10.6.45}$$

是到 $H_i^{\perp} \cap H$ 的正交投影算子。

定义

$$\boldsymbol{\Pi}_{i\downarrow j} = \boldsymbol{\Pi}_i\boldsymbol{\Pi}_{i-1}\cdots\boldsymbol{\Pi}_j \tag{10.6.46}$$

并引入符号

$$\boldsymbol{\Pi}_{i\downarrow} = \begin{cases} \boldsymbol{\Pi}_{k\downarrow 2}, & i=1 \\ \boldsymbol{\Pi}_{k-1\downarrow 1}, & i=k \\ \boldsymbol{\Pi}_{i-1\downarrow 1}\boldsymbol{\Pi}_{k\downarrow i=1}, & 2 \leqslant i \leqslant k-1 \end{cases} \tag{10.6.47}$$

Kayalar 与 Weinert[250] 证明了以下两个定理。

定理 10.6.1 斜投影算子 $\boldsymbol{E}_i\,(i=1,2,\cdots,k)$ 由下式给出：

$$\boldsymbol{E}_i = \begin{cases} \boldsymbol{P}_i\boldsymbol{\Pi}_{i-1\downarrow j+1}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{\Pi}_j\boldsymbol{\Pi}_{j\downarrow})^{-1}, & 1 \leqslant j \leqslant i-1 \\ \boldsymbol{P}_i\boldsymbol{\Pi}_{i-1\downarrow 1}\boldsymbol{\Pi}_{k\downarrow j+1}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{\Pi}_j\boldsymbol{\Pi}_{j\downarrow})^{-1}, & i \leqslant j \leqslant k \end{cases} \tag{10.6.48}$$

定理 10.6.2 斜投影算子 $\boldsymbol{E}_i\,(i=1,2,\cdots,k)$ 可以构造如下：

$$\boldsymbol{E}_i = \boldsymbol{P}_i\boldsymbol{\Pi}_{i\downarrow}(\boldsymbol{I} - \boldsymbol{\Pi}_{i\uparrow}\boldsymbol{\Pi}_i\boldsymbol{\Pi}_{i\downarrow})^{-1} \tag{10.6.49}$$

式中

$$\boldsymbol{\Pi}_{i\uparrow j} = \boldsymbol{\Pi}_i\boldsymbol{\Pi}_{i+1}\cdots\boldsymbol{\Pi}_j \tag{10.6.50}$$

$$\boldsymbol{\Pi}_{i\uparrow} = \begin{cases} \boldsymbol{\Pi}_{2\uparrow k}, & i=1 \\ \boldsymbol{\Pi}_{1\uparrow k-1}, & i=k \\ \boldsymbol{\Pi}_{i+1\uparrow k}\boldsymbol{\Pi}_{1\uparrow i-1}, & 2 \leqslant i \leqslant k-1 \end{cases} \tag{10.6.51}$$

10.7 满行秩矩阵的斜投影算子

在前面几节关于正交投影算子和斜正交投影算子的讨论中，均以满列秩的矩阵作为讨论对象。如果是满行秩矩阵，则相对应的正交投影算子和斜投影算子具有不同的定义与表达形式。

10.7.1 满行秩矩阵的斜投影算子定义

若 $\boldsymbol{D} \in C^{m\times k}$ 具有满行秩，即 $\text{rank}(\boldsymbol{D}) = m\ (m < k)$，则其投影矩阵 $\boldsymbol{P}_D$ 是一个 $k \times k$ 矩阵，定义为

$$\boldsymbol{P}_D = \boldsymbol{D}^{\mathrm{H}}(\boldsymbol{D}\boldsymbol{D}^{\mathrm{H}})^{-1}\boldsymbol{D} \tag{10.7.1}$$

考查矩阵 $\boldsymbol{B} \in C^{m\times k}$ 和 $\boldsymbol{C} \in C^{n\times k}$，它们都是满行秩矩阵，即 $\text{rank}(\boldsymbol{B}) = m, \text{rank}(\boldsymbol{C}) = n$，并且它们组合成的矩阵 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix} \in C^{(m+n)\times k}$ 也是满行秩的，即其秩为 $m+n$，其中，$m+n < k$。这意味着，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行向量与 $\boldsymbol{C}$ 的行向量线性无关。从而，矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行向量张成的值域空间 (简称行空间) $\mathcal{Z}_B$ 和矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的行空间 $\mathcal{Z}_C$ 是无交连的。

令 $\boldsymbol{D} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix}$，并代入到式 (10.7.1)，可求得正交投影算子

$$\boldsymbol{P}_D = [\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}, \boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{B}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{C}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix} \tag{10.7.2}$$

它可分解为

$$\boldsymbol{P}_D = \boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C} + \boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B} \tag{10.7.3}$$

式中

$$\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C} = [\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}, \boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{B}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{C}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix} \tag{10.7.4}$$

$$\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B} = [\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}}, \boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{B}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\\ \boldsymbol{C}\boldsymbol{B}^{\mathrm{H}} & \boldsymbol{C}\boldsymbol{C}^{\mathrm{H}}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix} \tag{10.7.5}$$

用矩阵 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix}$ 分别左乘以上两式，立即有

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix}\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix} \tag{10.7.6}$$

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix}\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix} \tag{10.7.7}$$

或等价为

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C} = \boldsymbol{B}, \qquad \boldsymbol{C}\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C} = \boldsymbol{O} \tag{10.7.8}$$

$$\boldsymbol{B}\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B} = \boldsymbol{O}, \qquad \boldsymbol{C}\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B} = \boldsymbol{C} \tag{10.7.9}$$

这表明，算子 $\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C}$ 与 $\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B}$ 之间无交叉项，即

$$\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C}\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B} = \boldsymbol{O} \quad 和 \quad \boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B}\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C} = \boldsymbol{O} \tag{10.7.10}$$

由正交投影算子 $\boldsymbol{P}_D$ 的幂等性，得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{P}_D^2 &= (\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C} + \boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B})(\boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C} + \boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B})\\ &= \boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C}^2 + \boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B}^2\\ &= \boldsymbol{P}_D = \boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_B|\mathcal{Z}_C} + \boldsymbol{E}_{\mathcal{Z}_C|\mathcal{Z}_B}\end{aligned}$$

由此有

$$E^2_{Z_B|Z_C} = E_{Z_B|Z_C}, \qquad E^2_{Z_C|Z_B} = E_{Z_C|Z_B} \tag{10.7.11}$$

由于具有幂等性，故 $E_{Z_B|Z_C}$ 和 $E_{Z_C|Z_B}$ 均为投影算子。又由式 (10.7.8) 和式 (10.7.9) 知，$E_{Z_B|Z_C}$ 和 $E_{Z_C|Z_B}$ 具有斜投影的几何意义。

满行秩矩阵的斜投影算子具有以下有用性质 [465]。

性质 1 若矩阵 B 的行空间与 C 的行空间正交，即 $BC^{\mathrm{H}} = O$，$CB^{\mathrm{H}} = O$，则斜投影退化为正交投影：

$$E_{Z_B|Z_C} = B^{\mathrm{H}}(BB^{\mathrm{H}})^{-1}B = P_B \tag{10.7.12}$$

$$E_{Z_C|Z_B} = C^{\mathrm{H}}(CC^{\mathrm{H}})^{-1}C = P_C \tag{10.7.13}$$

证明 将正交条件 $BC^{\mathrm{H}} = O$ 和 $CB^{\mathrm{H}} = O$ 代入式 (10.7.4)，立即有

$$\begin{aligned} E_{Z_B|Z_C} &= [B^{\mathrm{H}}, C^{\mathrm{H}}] \begin{bmatrix} BB^{\mathrm{H}} & O \\ O & CC^{\mathrm{H}} \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} B \\ O \end{bmatrix} \\ &= [B^{\mathrm{H}}, C^{\mathrm{H}}] \begin{bmatrix} (BB^{\mathrm{H}})^{-1} & O \\ O & (CC^{\mathrm{H}})^{-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} B \\ O \end{bmatrix} \\ &= B^{\mathrm{H}}(BB^{\mathrm{H}})^{-1}B \\ &= P_B \end{aligned}$$

类似地，可以证明 $E_{Z_C|Z_B} = C^{\mathrm{H}}(CC^{\mathrm{H}})^{-1}C = P_C$。 ■

性质 2 若 (1) $A = MB + NC$；(2) 矩阵 B 和 C 的行空间无交连，则

$$AE_{Z_B|Z_C} = MB \tag{10.7.14}$$

$$AE_{Z_C|Z_B} = NC \tag{10.7.15}$$

证明 由条件 (1) 知

$$\begin{aligned} AE_{Z_B|Z_C} &= (MB + NC)E_{Z_B|Z_C} \\ &= MBE_{Z_B|Z_C} + NCE_{Z_B|Z_C} \end{aligned}$$

但是，在条件 (2) 之下，式 (10.7.8) 成立。将式 (10.7.8) 代入上式，立即得 $AE_{Z_B|Z_C} = MB$。类似地，可以证明 $AE_{Z_C|Z_B} = NC$。 ■

10.7.2 斜投影的计算

由第 4 章知，$m \times n$ $(m > n)$ 实矩阵 A 的 QR 分解为

$$Q^{\mathrm{T}}A = \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} \tag{10.7.16}$$

式中，Q 为 $m \times m$ 正交矩阵，R 为上三角矩阵。

若 $\boldsymbol{B}$ 是一个列数大于行数的实矩阵 $\boldsymbol{B}$，则只要令 $\boldsymbol{B}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}$，并取 QR 分解式 (10.7.16) 的转置，即可得到矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的 LQ 分解如下：

$$\boldsymbol{BQ}=\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}=[\boldsymbol{L},\boldsymbol{O}] \tag{10.7.17}$$

或

$$\boldsymbol{B}=[\boldsymbol{L},\boldsymbol{O}]\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}} \tag{10.7.18}$$

式中，$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{R}^{\mathrm{T}}$ 为下三角矩阵。

令 $\boldsymbol{B}\in R^{m\times k},\boldsymbol{C}\in R^{n\times k}$, $\boldsymbol{A}\in R^{p\times k}$，其中，$(m+n+p)<k$，则矩阵 $\left[\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{A}^{\mathrm{T}}\right]^{\mathrm{T}}$ 的 LQ 分解为

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{A}\end{bmatrix}[\boldsymbol{Q}_1,\boldsymbol{Q}_2,\boldsymbol{Q}_3]=\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22} & \\ \boldsymbol{L}_{31} & \boldsymbol{L}_{32} & \boldsymbol{L}_{33}\end{bmatrix} \tag{10.7.19}$$

式中，$\boldsymbol{Q}_1\in R^{k\times m},\boldsymbol{Q}_2\in R^{k\times n},\boldsymbol{Q}_3\in R^{k\times p}$ 为正交矩阵，即 $\boldsymbol{Q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_i=\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{Q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_j=\boldsymbol{O},i\neq j$；并且 $\boldsymbol{L}_{ij}$ 为下三角矩阵。式 (10.7.19) 也可以等价写成

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{C}\\ \boldsymbol{A}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22} & \\ \boldsymbol{L}_{31} & \boldsymbol{L}_{32} & \boldsymbol{L}_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_3^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} \tag{10.7.20}$$

根据斜投影定义式 (10.7.4)，并利用 $\boldsymbol{Q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_i=\boldsymbol{I}$ 和 $\boldsymbol{Q}_i^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_j=\boldsymbol{O},i\neq j$，易求得

$$\begin{aligned}\boldsymbol{E}_{Z_B|Z_C}&=\left[\boldsymbol{B}^{\mathrm{T}},\boldsymbol{C}^{\mathrm{T}}\right]\begin{bmatrix}\boldsymbol{BB}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{BC}^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{CB}^{\mathrm{T}} & \boldsymbol{CC}^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\\ &=[\boldsymbol{Q}_1,\boldsymbol{Q}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\left\{\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1 & \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_2\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_1 & \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\boldsymbol{Q}_2\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}^{\mathrm{T}}\right\}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\\ &=[\boldsymbol{Q}_1,\boldsymbol{Q}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\end{aligned} \tag{10.7.21}$$

类似地，有

$$\boldsymbol{E}_{Z_C|Z_B}=[\boldsymbol{Q}_1,\boldsymbol{Q}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{C}\end{bmatrix} \tag{10.7.22}$$

注意到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 LQ 分解为

$$\boldsymbol{A}=[\boldsymbol{L}_{31},\boldsymbol{L}_{32},\boldsymbol{L}_{33}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_3^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}$$

由式 (10.7.21) 可求得 $p\times k$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间沿着与 $n\times k$ 矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的行空间平行的方向，到 $m\times k$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行空间的斜投影等于

$$\begin{aligned}\boldsymbol{AE}_{Z_B|Z_C}&=[\boldsymbol{L}_{31},\boldsymbol{L}_{32},\boldsymbol{L}_{33}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_3^{\mathrm{T}}\end{bmatrix}[\boldsymbol{Q}_1,\boldsymbol{Q}_2]\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\\ &=[\boldsymbol{L}_{31},\boldsymbol{L}_{32}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{B}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\end{aligned}$$

若令

$$[\boldsymbol{L}_{31}, \boldsymbol{L}_{32}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22} \end{bmatrix}^{-1} = [\boldsymbol{L}_B, \boldsymbol{L}_C] \tag{10.7.23}$$

则有 [465]

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{E}_{Z_B|Z_C} = [\boldsymbol{L}_B, \boldsymbol{L}_C] \begin{bmatrix} \boldsymbol{B} \\ \boldsymbol{O} \end{bmatrix} = \boldsymbol{L}_B \boldsymbol{B} \tag{10.7.24}$$

类似地，$p \times k$ 矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的行空间沿着与 $m \times k$ 矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行空间平行的方向，到 $n \times k$ 矩阵 $\boldsymbol{C}$ 的行空间的斜投影等于

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{E}_{Z_C|Z_B} = [\boldsymbol{L}_B, \boldsymbol{L}_C] \begin{bmatrix} \boldsymbol{O} \\ \boldsymbol{C} \end{bmatrix} = \boldsymbol{L}_C \boldsymbol{C} \tag{10.7.25}$$

由式 (10.7.23) 得

$$[\boldsymbol{L}_{31}, \boldsymbol{L}_{32}] = [\boldsymbol{L}_B, \boldsymbol{L}_C] \begin{bmatrix} \boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22} \end{bmatrix}$$

即有

$$\boldsymbol{L}_C = \boldsymbol{L}_{32} \boldsymbol{L}_{22}^{-1} \tag{10.7.26}$$

$$\boldsymbol{L}_B = (\boldsymbol{L}_{31} - \boldsymbol{L}_C \boldsymbol{L}_{21}) \boldsymbol{L}_{11}^{-1} = (\boldsymbol{L}_{31} - \boldsymbol{L}_{32} \boldsymbol{L}_{22}^{-1} \boldsymbol{L}_{21}) \boldsymbol{L}_{11}^{-1} \tag{10.7.27}$$

将以上两式分别代入式 (10.7.24) 和式 (10.7.25)，则有

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}\boldsymbol{E}_{Z_B|Z_C} &= (\boldsymbol{L}_{31} - \boldsymbol{L}_{32} \boldsymbol{L}_{22}^{-1} \boldsymbol{L}_{21}) \boldsymbol{L}_{11}^{-1} \boldsymbol{L}_{11} \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}} \\ &= (\boldsymbol{L}_{31} - \boldsymbol{L}_{32} \boldsymbol{L}_{22}^{-1} \boldsymbol{L}_{21}) \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}} \end{aligned} \tag{10.7.28}$$

$$\begin{aligned} \boldsymbol{A}\boldsymbol{E}_{Z_C|Z_B} &= \boldsymbol{L}_{32} \boldsymbol{L}_{22}^{-1} [\boldsymbol{L}_{21}, \boldsymbol{L}_{22}] \begin{bmatrix} \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}} \end{bmatrix} \\ &= \boldsymbol{L}_{32} \boldsymbol{L}_{22}^{-1} \boldsymbol{L}_{21} \boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}} + \boldsymbol{L}_{32} \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}} \end{aligned} \tag{10.7.29}$$

10.8 斜投影算子的应用

斜投影算子已经陆续应用于广义图像恢复 [495]、求解大型非对称方程组 [396]、快速系统辨识 [400]、多变元分析 [440]、偏相关 (PARCOR) 估计 [258]、脉冲噪声对消 [480]、误码校正编码 [301]、猝发误码校正解码 [266]、模型简化 [234]、系统建模 [34]、无线信道的估计 [465]、信道与发射字符的联合估计 [497]。下面介绍几个典型的应用。

10.8.1 系统建模

在系统辨识、参数估计、信号检测等实际情况中，除了感兴趣的信号 (简称期望信号) 外，往往存在其他干扰信号或加性有色噪声。此外，测量误差总是不可避免的，它们通常表现为高斯白噪声。不妨令 $\boldsymbol{\theta}$ 是期望信号待估计的参数向量，它通过一线性系统 $\boldsymbol{H}$ 后，产生期望信号 $\boldsymbol{x} = \boldsymbol{H}\boldsymbol{\theta}$。假定其他干扰信号向量与 (或) 加性有色噪声向量 $\boldsymbol{i}$ 由另外一个

合成的线性系统 $\boldsymbol{S}$ 所产生，即 $\boldsymbol{i}=\boldsymbol{S\phi}$。若观测数据向量为 $\boldsymbol{y}$，加性白色测量误差向量为 $\boldsymbol{e}$，则有

$$\boldsymbol{y}=\boldsymbol{H\theta}+\boldsymbol{S\phi}+\boldsymbol{e} \tag{10.8.1}$$

图 10.8.1 画出了这一观测模型的方框图。通常，产生期望信号的线性系统 $\boldsymbol{H}$ 的各个列向量不仅线性无关，而且与产生干扰或者有色噪声的线性系统 $\boldsymbol{S}$ 的各个列向量也线性无关。因此，由线性系统 $\boldsymbol{H}$ 的值域 Range($\boldsymbol{H}$) 与线性系统 $\boldsymbol{S}$ 的值域 Range($\boldsymbol{S}$) 是无交连的，但它们一般是不正交的。

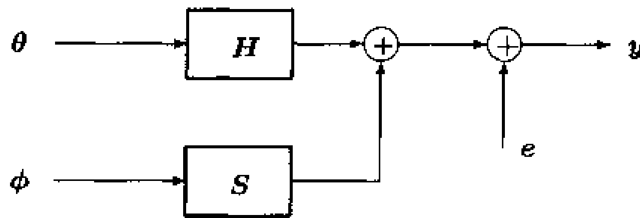


图 10.8.1 观测模型

由一线性系统产生的任何非期望信号常统称为结构化噪声 (structured noise)。假定结构化噪声与加性高斯白噪声 $\boldsymbol{e}$ 正交，则

$$\langle \boldsymbol{S\phi},\boldsymbol{e}\rangle=0 \implies \boldsymbol{\phi}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}=0,\ \forall \boldsymbol{\phi}\neq \boldsymbol{0} \implies \boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}=\boldsymbol{0} \tag{10.8.2}$$

类似地，设期望信号也与加性高斯白噪声正交，又有

$$\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}=\boldsymbol{0} \tag{10.8.3}$$

给定矩阵 $\boldsymbol{H}$ 和 $\boldsymbol{S}$，系统建模的目的是估计与期望信号有关的系统参数向量 $\boldsymbol{\theta}$。为此，用正交投影矩阵 $\boldsymbol{P}_S^{\perp}$ 左乘式 (10.8.1)，即得

$$\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H\theta}+\boldsymbol{e} \tag{10.8.4}$$

这里使用了 $\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{S}=\boldsymbol{O}$ 和 $\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{e}=[\boldsymbol{I}-\boldsymbol{S}(\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{S})^{-1}\boldsymbol{S}^{\mathrm{H}}]\boldsymbol{e}=\boldsymbol{e}$。

用矩阵 $\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}$ 左乘式 (10.8.4) 两边，并利用 $\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{e}=\boldsymbol{0}$，易知

$$\boldsymbol{\theta}=(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{y} \tag{10.8.5}$$

于是，期望信号的估计为

$$\hat{\boldsymbol{x}}=\boldsymbol{H\theta}=\boldsymbol{H}(\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{H})^{-1}\boldsymbol{H}^{\mathrm{H}}\boldsymbol{P}_S^{\perp}\boldsymbol{y}=\boldsymbol{E}_{H|S}\boldsymbol{y} \tag{10.8.6}$$

即期望信号的估计是观测数据向量 $\boldsymbol{y}$ 沿着与矩阵 $\boldsymbol{S}$ 的列空间平行的方向，到 $\boldsymbol{H}$ 的列空间上的斜投影。

10.8.2 信道与字符联合估计

考虑单个输入 M 个输出的有限冲激响应 (FIR) 系统：

$$\boldsymbol{y}(k)=\sum_{l=0}^{L}\boldsymbol{h}_l x(k-l)+\boldsymbol{v}(k)=[\boldsymbol{h}_L,\cdots,\boldsymbol{h}_1,\boldsymbol{h}_0]\begin{bmatrix}x(k-L)\\ \vdots\\ x(k-1)\\ x(k)\end{bmatrix}+\boldsymbol{v}(k) \tag{10.8.7}$$

式中，$x(k)$ 是用户在 k 时刻的发射字符序列，为复标量；$\boldsymbol{h}_l$ 是信道冲激响应向量；$\boldsymbol{v}(k)$ 为加性复噪声向量；而

$$\boldsymbol{y}(k)=[y_1(k),y_2(k),\cdots,y_M(k)]^{\mathrm{T}}$$

表示 M 个阵元的观测数据。

定义矩阵

$$\boldsymbol{Y}_{a|b}\overset{\text{def}}{=}\begin{bmatrix}\boldsymbol{y}(a) & \boldsymbol{y}(a+1) & \cdots & \boldsymbol{y}(a+j-1)\\ \boldsymbol{y}(a+1) & \boldsymbol{y}(a+2) & \cdots & \boldsymbol{y}(a+j)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \boldsymbol{y}(b) & \boldsymbol{y}(b+1) & \cdots & \boldsymbol{y}(b+j-1)\end{bmatrix} \tag{10.8.8}$$

$$\boldsymbol{X}_{a|b}\overset{\text{def}}{=}\begin{bmatrix}x(a) & x(a+1) & \cdots & x(a+j-1)\\ x(a+1) & a(a+2) & \cdots & x(a+j)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ x(b) & x(b+1) & \cdots & x(b+j-1)\end{bmatrix} \tag{10.8.9}$$

$$\boldsymbol{H}=[\boldsymbol{h}_L,\cdots,\boldsymbol{h}_1,\boldsymbol{h}_0] \tag{10.8.10}$$

则当 $k=a,a+1,\cdots,a+i-1$ 时，式 (10.8.7) 可以写成

$$\begin{aligned}\boldsymbol{Y}_{a|a+i-1}&=\underbrace{\begin{bmatrix}\boldsymbol{H} & \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \cdots\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{H} & \boldsymbol{O} & \cdots\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ \boldsymbol{O} & \boldsymbol{O} & \cdots & \boldsymbol{H}\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{\mathcal{H}}_i}\underbrace{\begin{bmatrix}x(a-L) & x(a-L+1) & \cdots & x(a-L+j-1)\\ x(a-L+1) & x(a-L+2) & \cdots & x(a-L+j)\\ \vdots & \vdots & & \vdots\\ x(a+i-1) & x(a+i) & \cdots & x(a+i+j-2)\end{bmatrix}}_{\boldsymbol{X}_{a-L|a+i-1}}+\\ &\quad\ \mathcal{V}_{a|a+i-1}\\ &=\boldsymbol{\mathcal{H}}_i\boldsymbol{X}_{a-L|a+i-1}+\mathcal{V}_{a|a+i-1}\end{aligned} \tag{10.8.11}$$

式中，$\boldsymbol{\mathcal{H}}_i$ 是一个 $Mi\times(L+1)i$ 矩阵，且 i 表示数据模型的平滑因子。

构造一数据矩阵，并将其分块为“过去”输出矩阵 $\boldsymbol{Y}_{\mathrm{pa}}$，“现在”输出矩阵 $\boldsymbol{Y}_{\mathrm{pr}}$ 和“将

来”输出矩阵 $\boldsymbol{Y}_{\rm fu}$，即

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{Y}_{\rm pa}\\ \hdashline \boldsymbol{Y}_{\rm pr}\\ \hdashline \boldsymbol{Y}_{\rm fu}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{Y}_{1|i}\\ \hdashline \boldsymbol{Y}_{i+1|i+L}\\ \hdashline \boldsymbol{Y}_{i+L+1|2i+L}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{y}_1 & \cdots & \boldsymbol{y}_j\\ \vdots & & \vdots\\ \boldsymbol{y}_i & \cdots & \boldsymbol{y}_{i+j-1}\\ \hdashline \boldsymbol{y}_{i+1} & \cdots & \boldsymbol{y}_{i+j}\\ \vdots & & \vdots\\ \boldsymbol{y}_{i+L} & \cdots & \boldsymbol{y}_{i+L+j-1}\\ \hdashline \boldsymbol{y}_{i+L+1} & \cdots & \boldsymbol{y}_{i+L+j}\\ \vdots & & \vdots\\ \boldsymbol{y}_{2i+L} & \cdots & \boldsymbol{y}_{2i+L+j-1}\end{bmatrix} \tag{10.8.12}$$

命题 10.8.1 假设

(1) $\mathcal{H}_i$ 具有满列秩；

(2) 矩阵 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_{1-L|i}\\ \boldsymbol{X}_{i+1|2i+L}\end{bmatrix}$ 具有满行秩，即 $\text{rank}\left(\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_{1-L|i}\\ \boldsymbol{X}_{i+1|2i+L}\end{bmatrix}\right)=2(L+i)$。

若令

$$\boldsymbol{W}_1=\boldsymbol{Y}_{\rm pr}\boldsymbol{E}_{Y_{\rm pa}|Y_{\rm fu}},\quad \boldsymbol{W}_2=\boldsymbol{Y}_{\rm pr}\boldsymbol{E}_{Y_{\rm fu}|Y_{\rm pa}} \tag{10.8.13}$$

则有

$$\boldsymbol{Y}_{\rm pr}=\boldsymbol{W}_1+\boldsymbol{W}_2 \tag{10.8.14}$$

并且

$$\boldsymbol{W}_1=\mathcal{H}_L(:,1:L)\boldsymbol{X}_{i+1-L|i} \tag{10.8.15}$$

$$\boldsymbol{W}_2=\mathcal{H}_L(:,L+1:2L)\boldsymbol{X}_{i+1|i+L} \tag{10.8.16}$$

式中

$$\mathcal{H}_L(:,1:L)=\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_L & \cdots & \boldsymbol{h}_1\\ & \ddots & \vdots\\ & & \boldsymbol{h}_L\end{bmatrix},\quad \mathcal{H}_L(:,L+1:2L)=\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_0 & & \\ \vdots & \ddots & \\ \boldsymbol{h}_{L-1} & \cdots & \boldsymbol{h}_0\end{bmatrix} \tag{10.8.17}$$

证明 [465] 由假设 (1) 知，矩阵 $\mathcal{H}_i$ 存在左伪逆矩阵 $\mathcal{H}_i^\dagger=(\mathcal{H}_i^{\rm H}\mathcal{H}_i)^{-1}\mathcal{H}_i^{\rm H}$。因此，$\boldsymbol{Y}_{\rm pr}$ 可以写成 $\boldsymbol{Y}_{\rm pa}$ 和 $\boldsymbol{Y}_{\rm fu}$ 的线性组合，即有

$$\begin{aligned}\boldsymbol{Y}_{\rm pr}&=\mathcal{H}_L\begin{bmatrix}\boldsymbol{X}_{i+1-L|i}\\ \hdashline \boldsymbol{X}_{i+1|i+L}\end{bmatrix}=\mathcal{H}_L\begin{bmatrix}[\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_L]\mathcal{H}_i^\dagger\boldsymbol{Y}_{\rm pa}\\ \hdashline [\boldsymbol{I}_L,\boldsymbol{0}]\mathcal{H}_i^\dagger\boldsymbol{Y}_{\rm fu}\end{bmatrix}\\ &=[\mathcal{H}_L(:,1:L),\mathcal{H}_L(:,L+1:2L)]\begin{bmatrix}[\boldsymbol{0},\boldsymbol{I}_L]\mathcal{H}_i^\dagger\boldsymbol{Y}_{\rm pa}\\ \hdashline [\boldsymbol{I}_L,\boldsymbol{0}]\mathcal{H}_i^\dagger\boldsymbol{Y}_{\rm fu}\end{bmatrix}\\ &=[\boldsymbol{0},\mathcal{H}_L(:,1:L)]\mathcal{H}_i^\dagger\boldsymbol{Y}_{\rm pa}+[\mathcal{H}_L(:,L+1:2L),\boldsymbol{0}]\mathcal{H}_i^\dagger\boldsymbol{Y}_{\rm fu}\\ &=\boldsymbol{W}_1+\boldsymbol{W}_2\end{aligned} \tag{1}$$

又由假设 (2) 知，矩阵 $\boldsymbol{Y}_{\rm pa}=\boldsymbol{Y}_{1|i}$ 和 $\boldsymbol{Y}_{\rm fu}=\boldsymbol{Y}_{i+L+1|2i+L}$ 的行空间无交连。对式 (1) 应用满行秩矩阵的斜投影算子的性质 2，可求得斜投影

$$\begin{aligned}\boldsymbol{W}_1&=[\boldsymbol{0},\mathcal{H}_L(:,1:L)]\mathcal{H}_i^{\dagger}\boldsymbol{Y}_{1|i}\\&=\begin{bmatrix}0&\boldsymbol{h}_L&\cdots&\boldsymbol{h}_1\\\vdots&\ddots&\ddots&\vdots\\0&\cdots&0&\boldsymbol{h}_L\end{bmatrix}\boldsymbol{X}_{1-L|i}\\&=\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_L&\cdots&\boldsymbol{h}_1\\\vdots&&\vdots\\0&\cdots&\boldsymbol{h}_L\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x(i+1-L)&\cdots&x(i+j-L)\\\vdots&&\vdots\\x(i)&\cdots&x(i+j-1)\end{bmatrix}\\&=\mathcal{H}_L(:,1:L)\boldsymbol{X}_{i+1-L|i}\end{aligned}$$

类似地，可以证明

$$\begin{aligned}\boldsymbol{W}_2&=\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_0&&\\\vdots&\ddots&\\\boldsymbol{h}_{L-1}&\cdots&\boldsymbol{h}_0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}x(i+1)&\cdots&x(i+j)\\\vdots&&\vdots\\x(i+L)&\cdots&x(i+L+j-1)\end{bmatrix}\\&=\mathcal{H}_L(:,L+1:2L)\boldsymbol{X}_{i+1|i+L}\end{aligned}$$

这就证明了本命题。 ■

定义

$$\mathcal{P}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{W}_1(1:(L-1)M,2:j)-\boldsymbol{W}_1(M+1:LM,1:j-1)\\\boldsymbol{W}_1((L-1)M+1:LM,2:j)\end{bmatrix}\tag{10.8.18}$$

$$\mathcal{Q}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{W}_2(1:M,1:j-1)\\\boldsymbol{W}_2(M+1:(L+1)M,1:j-1)-\boldsymbol{W}_2(1:LM,2:j)\end{bmatrix}\tag{10.8.19}$$

则有

$$\begin{aligned}\mathcal{P}=&\left[\begin{array}{cccc|c}\boldsymbol{h}_L&\boldsymbol{h}_{L-1}&\cdots&\boldsymbol{h}_2&\boldsymbol{h}_1\\&\boldsymbol{h}_L&\cdots&\boldsymbol{h}_3&\boldsymbol{h}_2\\&&\ddots&&\vdots\\&&&\boldsymbol{h}_L&\boldsymbol{h}_{L-1}\\0&&&&\boldsymbol{h}_L\end{array}\right]\left[\begin{array}{cccc}x(i+2-L)&x(i+3-L)&\cdots&x(i+j-L)\\x(i+3-L)&x(i+4-L)&\cdots&x(i+j+1-L)\\\vdots&\vdots&&\vdots\\x(i)&x(i+1)&\cdots&x(i+j-2)\\\hline x(i+1)&x(i+2)&\cdots&x(i+j-1)\end{array}\right]-\\&\left[\begin{array}{c|cccc}0&\boldsymbol{h}_L&\boldsymbol{h}_{L-1}&\cdots&\boldsymbol{h}_2\\0&&\boldsymbol{h}_L&\cdots&\boldsymbol{h}_3\\\vdots&&&\ddots&\vdots\\0&&&&\boldsymbol{h}_L\\0&0&&&\end{array}\right]\left[\begin{array}{cccc}x(i+1-L)&x(i+2-L)&\cdots&x(i+j-L-1)\\\hline x(i+2-L)&x(i+3-L)&\cdots&x(i+j-L)\\\vdots&\vdots&&\vdots\\x(i-1)&x(i)&\cdots&x(i+j-3)\\x(i)&x(i+1)&\cdots&x(i+j-2)\end{array}\right]\\=&\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_1\\\boldsymbol{h}_2\\\vdots\\\boldsymbol{h}_L\end{bmatrix}[x(i+1),x(i+2),\cdots,x(i+j-1)]\end{aligned}\tag{10.8.20}$$

类似地，有

$$\mathcal{Q}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_0\\ \boldsymbol{h}_1\\ \vdots\\ \boldsymbol{h}_{L-1}\end{bmatrix}[x(i+1),x(i+2),\cdots,x(i+j-1)] \tag{10.8.21}$$

综合式 (10.8.20) 和式 (10.8.21)，得

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}\\ \mathcal{P}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\mathcal{Q}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_0\\ 2\boldsymbol{h}_1\\ \vdots\\ 2\boldsymbol{h}_{L-1}\\ \boldsymbol{h}_L\end{bmatrix}[x(i+1),x(i+2),\cdots,x(i+j-1)] \tag{10.8.22}$$

显然，这是一个秩为 1 的矩阵。令奇异值分解

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}\\ \mathcal{P}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\mathcal{Q}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=\boldsymbol{U}\boldsymbol{\Sigma}\boldsymbol{V}^{\mathrm{T}} \tag{10.8.23}$$

由于秩 1 矩阵只有一个非零奇异值，式中的奇异值矩阵 $\boldsymbol{\Sigma}=\mathrm{diag}(\sigma_1,0,\cdots,0)$。因此，上式可以写作

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}\\ \mathcal{P}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\mathcal{Q}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}=\boldsymbol{U}(:,1)[\sigma_1\boldsymbol{V}(1,1),\sigma_1\boldsymbol{V}(2,1),\cdots,\sigma_1\boldsymbol{V}(j-1,1)] \tag{10.8.24}$$

比较式 (10.8.22) 和式 (10.8.24) 知

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{h}_0\\ 2\boldsymbol{h}_1\\ \vdots\\ 2\boldsymbol{h}_{L-1}\\ \boldsymbol{h}_L\end{bmatrix}=\boldsymbol{U}(:,1),\qquad \begin{bmatrix}x(i+1)\\ x(i+2)\\ \vdots\\ x(i+j-1)\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\sigma_1\boldsymbol{V}(1,1)\\ \sigma_1\boldsymbol{V}(2,1)\\ \vdots\\ \sigma_1\boldsymbol{V}(j-1,1)\end{bmatrix} \tag{10.8.25}$$

当存在白噪声时，与矩阵 $\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}\\ \mathcal{P}\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}\mathcal{Q}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}$ 的最大奇异值对应的左奇异向量 $\boldsymbol{U}(:,1)$ 和右奇异向量 $\boldsymbol{V}(:,1)$ 分别给出信道向量和发射字符的估计。

以上讨论可以归纳为下述信道与字符联合估计的斜投影算法 [465]。

算法 10.8.1 (信道与字符联合估计的斜投影算法)

步骤 1 计算数据矩阵的 LQ 分解

$$\begin{bmatrix}\boldsymbol{Y}_{\mathrm{pa}}\\ \boldsymbol{Y}_{\mathrm{pr}}\\ \boldsymbol{Y}_{\mathrm{fu}}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22} & \\ \boldsymbol{L}_{31} & \boldsymbol{L}_{32} & \boldsymbol{L}_{33}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_1^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_2^{\mathrm{T}}\\ \boldsymbol{Q}_3^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} \tag{10.8.26}$$

步骤 2 确定信道的阶数 L。

步骤 3 计算 $\boldsymbol{W}_1$ 和 $\boldsymbol{W}_2$：

$$\boldsymbol{W}_1=[\boldsymbol{L}_{31},\boldsymbol{L}_{32}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{I}_{Mi}\\ \boldsymbol{O}\end{bmatrix}\boldsymbol{Y}_{\mathrm{pa}} \tag{10.8.27}$$

$$\boldsymbol{W}_2=[\boldsymbol{L}_{31},\boldsymbol{L}_{32}]\begin{bmatrix}\boldsymbol{L}_{11} & \\ \boldsymbol{L}_{21} & \boldsymbol{L}_{22}\end{bmatrix}^{-1}\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}\\ \boldsymbol{I}_{Mi}\end{bmatrix}\boldsymbol{Y}_{\mathrm{fu}} \tag{10.8.28}$$

步骤 4 按照式 (10.8.20) 和式 (10.8.21) 构造矩阵 $\mathcal{P}$ 和 $\mathcal{Q}$。

步骤 5 由式 (10.8.25) 计算信道向量和发射字符的估计。

本章小结

向量或矩阵到子空间的投影分为正交投影和斜投影两大类。正交投影是斜投影的特例。描述正交投影的矩阵分为投影矩阵和正交投影矩阵。本章从数学和信号处理的不同观点出发，对投影矩阵进行了讨论与分析，并得到了相同的结果。接着，又介绍了投影矩阵与正交投影矩阵的递推计算及其在自适应滤波器设计中的应用。

斜投影刻画了另一类重要的科学与技术问题：沿着一个子空间到另一个子空间的投影。本章围绕满列秩矩阵和满行秩矩阵的斜投影算子，重点介绍了它们的性质、计算方法以及几种典型应用。

习　题

10.1 证明唯一的非奇异幂等矩阵为单位矩阵。

10.2 若 $\boldsymbol{A}$ 为幂等矩阵，证明

(1) 矩阵 $\boldsymbol{A}^k$ 具有与 $\boldsymbol{A}$ 相同的特征值。

(2) $\boldsymbol{A}^k$ 与 $\boldsymbol{A}$ 具有相同的秩。

10.3 假定 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 为对称矩阵，并且 $\boldsymbol{B}$ 正定。若 $\boldsymbol{AB}$ 的所有特征值为 1 或者 0，证明 $\boldsymbol{AB}$ 是幂等矩阵。

10.4 若 $\boldsymbol{A},\boldsymbol{B}$ 为 $n\times n$ 幂等矩阵，并且 $\boldsymbol{AB}=\boldsymbol{BA}$，证明 $\boldsymbol{AB}$ 也是幂等矩阵。

10.5 证明：

(1) 满足 $\boldsymbol{A}^2=\boldsymbol{O}$ 的幂零矩阵 $\boldsymbol{A}$ 奇异。

(2) 若 $\boldsymbol{A}^i=\boldsymbol{O}, i=1,2,\cdots,k-1$，但 $\boldsymbol{A}^k\neq\boldsymbol{O}$，则 $\boldsymbol{A}$ 奇异。

10.6 令 $\boldsymbol{X}$ 表示观测数据矩阵，现在用它估计向量 $\boldsymbol{y}$。已知两个观测数据向量 $\boldsymbol{x}_1=[2,1,2,3]^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{x}_2=[1,2,1,1]^{\mathrm{T}}$。若使用它们估计 $\boldsymbol{y}=[1,2,3,2]^{\mathrm{T}}$，求估计的误差平方和。（提示：令最优滤波器为 $\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}$，则有观测方程 $\boldsymbol{X}\boldsymbol{w}_{\mathrm{opt}}=\boldsymbol{y}$。）

10.7 证明：若 $\boldsymbol{P}$ 是沿着子空间 H 到子空间 S 的投影算子，则 $\boldsymbol{P}^{\mathrm{H}}$ 是沿着子空间 S 到子空间 H 的投影算子。

10.8 假定 $\boldsymbol{V}_1,\boldsymbol{V}_2$ 分别由复向量向量 C^n 的子空间 W 的两组正交基组成，证明

$$\boldsymbol{V}_1\boldsymbol{V}_1^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}=\boldsymbol{V}_2\boldsymbol{V}_2^{\mathrm{H}}\boldsymbol{x}$$

对所有向量 $\boldsymbol{x}$ 成立。

10.9 证明：若投影算子 $\boldsymbol{P}_1$ 和 $\boldsymbol{P}_2$ 是可交换的，即 $\boldsymbol{P}_1=\boldsymbol{P}_2=\boldsymbol{P}_2\boldsymbol{P}_1$，则它们的乘积 $\boldsymbol{P}=\boldsymbol{P}_1\boldsymbol{P}_2$ 是一投影算子；并求 $\boldsymbol{P}$ 的值域 Range($\boldsymbol{P}$) 和零空间 Null($\boldsymbol{P}$)。

10.10 令 $\boldsymbol{P}$ 为一投影算子，并且 $\text{Range}(\boldsymbol{P}) = \text{Col}(\boldsymbol{U})$，$\text{Null}(\boldsymbol{P}) = \text{Col}(\boldsymbol{V})$。试用矩阵 $\boldsymbol{U}$ 和 $\boldsymbol{V}$ 表示投影算子 $\boldsymbol{P}$。

10.11 已知矩阵

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 6 & 2 \\ -7 & 6 \end{bmatrix}$$

和

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \end{bmatrix}$$

分别求它们的 Moore-Penrose 逆矩阵 $\boldsymbol{A}^{\dagger}$，并解释为什么 $\boldsymbol{A}\boldsymbol{A}^{\dagger}$ 和 $\boldsymbol{A}^{\dagger}\boldsymbol{A}$ 分别是到矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列空间和行空间的正交投影。

10.12 证明下列关系为真：

$$\boldsymbol{X}_{1,k}(n) = \begin{bmatrix} \mathbf{0}_k^{\mathrm{T}} \\ \boldsymbol{X}_{0,k-1}(n-1) \end{bmatrix}$$

和

$$\boldsymbol{P}_{1,k}(n) = \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{0}_{k-1}^{\mathrm{T}} \\ \mathbf{0}_{k-1} & \boldsymbol{P}_{0,k-1}(n-1) \end{bmatrix}$$

式中，$\mathbf{0}_k$ 为 $k \times 1$ 维零向量。

10.13 如果 j 阶最小二乘后向预测误差向量由

$$\boldsymbol{P}_{0,j-1}^{\perp}(n) z^{-j} \boldsymbol{x}(n) = \boldsymbol{e}_j^{\mathrm{b}}(n)$$

给出，证明

$$\boldsymbol{P}_{1,j}^{\perp}(n) z^{-j-1} \boldsymbol{x}(n) = z^{-1} \boldsymbol{e}_j^{\mathrm{b}}(n)$$

10.14 用逆矩阵

$$\langle \boldsymbol{X}_{1,p}(n-1), \boldsymbol{X}_{1,p}(n-1) \rangle^{-1}$$

表示逆矩阵

$$\langle \boldsymbol{X}_{1,p}(n), \boldsymbol{X}_{1,p}(n) \rangle^{-1}$$

10.15 假定两个基向量

$$\boldsymbol{u}_1 = [-1, 2, -4, 3, 1]^{\mathrm{T}}$$
$$\boldsymbol{u}_2 = [5, 6, 2, -2, -1]^{\mathrm{T}}$$

生成向量空间 $\text{Range}(\boldsymbol{U}) = \text{Span}\{\boldsymbol{u}_1, \boldsymbol{u}_2\}$。试问向量

$$\boldsymbol{v} = [-31, -18, -34, 28, 11]^{\mathrm{T}}$$

是否在向量空间 $\text{Range}(\boldsymbol{U})$ 内，并加以证明。

10.16 已知

$$\gamma_m(n-1) = \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n) \boldsymbol{\pi}(n) \rangle$$

证明

$$\gamma_m(n) = \langle \boldsymbol{\pi}(n), \boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n)\boldsymbol{\pi}\rangle$$

10.17 给定一时间信号 $\boldsymbol{v}(n) = [v(1), v(2), v(3), \cdots, v(n)]^{\mathrm{T}} = [4, 2, 4, \cdots]^{\mathrm{T}}$。计算

(1) 数据向量 $\boldsymbol{v}(2)$ 和 $\boldsymbol{v}(3)$。

(2) 向量 $z^{-1}\boldsymbol{v}(2)$ 和 $z^{-2}\boldsymbol{v}(2)$。

(3) 向量 $z^{-1}\boldsymbol{v}(3)$ 和 $z^{-2}\boldsymbol{v}(3)$。

10.18 已知前向和后向预测残差分别为

$$\epsilon_m^{\mathrm{f}}(n) = \langle \boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{P}_{1,m}^{\perp}(n)\boldsymbol{x}(n)\rangle$$
$$\epsilon_m^{\mathrm{b}}(n) = \langle z^{-m}\boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{P}_{0,m-1}^{\perp}(n)z^{-m}\boldsymbol{x}(n)\rangle$$

和偏相关系数 $\Delta_{m+1}(n) = \langle \boldsymbol{e}_m^{\mathrm{f}}(n), z^{-1}\boldsymbol{e}_m^{\mathrm{b}}(n)\rangle$。证明

$$\epsilon_{m+1}^{\mathrm{f}}(n) = \epsilon_m^{\mathrm{f}}(n) - \frac{\Delta_{m+1}^2(n)}{\epsilon_m^{\mathrm{b}}(n-1)}$$
$$\epsilon_{m+1}^{\mathrm{b}}(n) = \epsilon_m^{\mathrm{b}}(n-1) - \frac{\Delta_{m+1}^2(n)}{\epsilon_m^{\mathrm{f}}(n)}$$

10.19 令 $\boldsymbol{U}$ 是 $n \times N$ 实矩阵，并且满列秩，则

$$\boldsymbol{K}_U = \langle \boldsymbol{U}, \boldsymbol{U}\rangle^{-1}\boldsymbol{U}^{\mathrm{T}}$$

称为列空间 $U = \mathrm{Span}(\boldsymbol{U})$ 的横向滤波器算子。考虑新的列空间 $Uu = \mathrm{Span}\{\boldsymbol{U}, \boldsymbol{u}\}$，试证明横向滤波器算子的下列递推公式：

$$\boldsymbol{K}_{U\mathrm{u}} = \begin{bmatrix}\boldsymbol{K}_U \\ \boldsymbol{0}_N^{\mathrm{T}}\end{bmatrix} + \left(\begin{bmatrix}1 \\ \boldsymbol{0}_N\end{bmatrix} - \begin{bmatrix}0 \\ \boldsymbol{K}_U\boldsymbol{u}\end{bmatrix}\right)\langle \boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}, \boldsymbol{P}_U^{\perp}\boldsymbol{u}\rangle^{-1}\boldsymbol{u}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{P}_U^{\perp}$$

(提示: 使用正交投影矩阵的递推公式。)

10.20 记

$$\{\boldsymbol{U}, \boldsymbol{u}\} = \{\boldsymbol{x}(n), z^{-1}\boldsymbol{x}(n), \cdots, z^{-N+1}\boldsymbol{x}(n), \boldsymbol{\pi}(n)\}$$
$$= \{\boldsymbol{X}_{0,N-1}(n), \boldsymbol{\pi}(n)\}$$

证明

$$\boldsymbol{K}_{0,N-1,\pi}(n) = \begin{bmatrix}\boldsymbol{K}_{0,N-1}(n-1) & \boldsymbol{0}_N \\ \boldsymbol{y}^{\mathrm{T}}(n-1) & 1\end{bmatrix}$$

式中，$\boldsymbol{y}(n-1)$ 是一任意向量。 (提示: 使用 $\boldsymbol{P}_{0,N-1,\pi}(n)$ 的递推公式。)

参考文献

[1] Abatzoglou T J, Mendel J M. Constrained total least squares. In: Proc 1987 IEEE ICASSP, TX: Dallas, 1987, 1485~1488

[2] Abatzoglou T J, Soon V. Constrained total least squares approach to frequency estimation of sinusoids. In: Proc 4th IEEE ASSP Workshop on Spectrum Analysis Modeling, MN: Minneapolis, 1988, 250~252

[3] Abatzoglos T J, Mendel J M, and Harada G A. The constrained total least squares technique and its applications to harmonic superresolution. IEEE Trans Signal Processing, 1991, 39: 1070~1087

[4] Abdullah J, Neudecker H, Liu S. Problem 92.4.6. Econometric Theory, 1992, 8: 584 (Solution in Econometric Theory, 1993, 9: 703)

[5] Abed-Meraim K, Chkeif A, Hua Y. Fast orthonormal PAST algorithm. IEEE Signal Processing Letters, 2000, 7(3): 60~62

[6] Abbott D. The Biographical Dictionary of Sciences: Mathematicians. New York: P. Bedrick Books, 1986

[7] Absil P A, Mahony R, Sepulchre R, Van Dooren P. Grassmann-Rayleigh quotient iteration for computing invariant subspace. SIAM Review, 2002, 44(1): 57~73

[8] Adamyan V M, Arov D Z. A general solution of a problem in linear prediction of stationary processes. Theory Probab Appl, 1968, 13: 294~407

[9] Adib A, Moreau E, Aboutajdine D. Source separation contrasts using a reference signal. IEEE Signal Processing Letters, 2004, 11(3): 312~315

[10] Afriat S N. Orthogonal and oblique projectors and the characteristics of pairs of vector spaces. Math PROC Cambridge Philos Soc, 1957, 53: 800~816

[11] Aitken A C. Detrminants and Matrices. 4th ed. Edinburgh: Oliver and Boyd, 1946

[12] Alexander S T. Adaptive Signal Processing: Theory and Applications. New York: Springer-Verlag, 1986

[13] Alexander S T. Fast adaptive filters: A geometrical approach. IEEE ASSP Mag, 1991, 3(4): 18~28

[14] Amari S. Natural gradient works efficiently in learning. Neural Computation, 1998, 10: 251~276

[15] Ammann L P. Robust singular value decompositions — A new approach to projection pursuit. J Amer Stat Assoc, 1993, 88: 505~514

[16] Ammar G S, Gragg W B. Superfast solution of real position definite Toeplitz systems. In: P N Datta, et al eds. Linear Algebra in Signals, Systems and Control. SIAM, 1988, 107~125

[17] Andrews H C, Kane J. Kronecker matrices, computer implementation, and generalized spectra. J Assoc Comput Mach, 1970, 17: 260~268

[18] Andrews H C, Caspari K L. A generalized technique for spectral analysis. IEEE Trans Comput, 1970, 19: 16~25

[19] Andrews H, Hunt B. Digital Image Restoration. Cliffts, NJ: Prentice-Hall, 1977

[20] Anton H, Rorrer C. Elementary Linear Algebra. 8th ed. New York: John Wiley & Sons, Inc, 2000

[21] Aronszajn N. Theory of reproducing kermels. Trans Amer Math Soc, 1950, 68: 800~816

[22] Autonne L. Sur les groupes lineaires, reelles et orthogonaus. Bull Soc Math, France, 1902, 30: 121~133

[23] Axelssón O. Iterative Solution Methods. New York: Cambridge Univ Press, 1994

[24] Bai Z, Demmel J W. Computing the generalized singular value decomposition. SIAM J Sci Comput, 1993, 14: 1464~1486

[25] Banachiewicz T. Zur Berechungung der Determinanten, wie auch der Inverse, und zur darauf basierten Auflösung der Systeme linearer Gleichungen. Acta Astronomica, Sér C, 1937, 3: 41~67

[26] Barabell A J. Improving the resolution performance of eigenstucture based direction-fading algorithms. Proc. ICASSP-83, 1983, Boston, 336~339

[27] Barlow J, Demmel J, Computing accurate eigensystems of scaled diagonally dominant matrices. SIAM J. Numer. Anal., 1990, 27: 762~791

[28] Barbarossa S, Daddio E, Galati G. Comparison of optimum and linear prediction technique for clutter cancellation. Proc IEE, Part F, 1987, 134: 277~282

[29] Barnett S. Matrices: Methods and Applications. Oxford: Clarendon Press, 1990

[30] Barth T, Manteuffel T. Multiple recursion conjugate gradient algorithms, Part I: Sufficient conditions. SIAM J. Matrix Anal. Appl., 2000, 21(3): 768~796

[31] Baykal B, Constantinides G. Underdetermined-order recursive least-squares adaptive filtering: The concept and algorithms. IEEE Trans Signal Processing, 1997, 45(2): 346~362

[32] Beattie C, Fox D. Schur complements and the Weinstein-Aronszajn theory for modified matrix eigenvalue problems. Univ Minnesota Supercomputer Institute, Tech Rep, 1987

[33] Beex A A. Fast recursive/iterative Toeplitz eigenspace decomposition. In: I T Young et al eds. EURASIP, North-Holland, 1986, 1001~1004

[34] Behrens R T, Scharf L L. Signal processing applications of oblique projection operators. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42(6): 1413~1424

[35] Bell A J, Sejnowski T J. An information-maximization approach to blind separation and blind deconvolution. Neural Computation, 1995, 7(6): 1129~1159

[36] Bellman R. Introduction to Matrix Analysis. 2nd ed. New York: McGraw-Hill, 1970

[37] Belochrani A, Abed-Merain K, Cardoso J F, Moulines E. A blind source separation technique using second-order statistics. IEEE Trans Signal Processing, 1997, 45(2): 434~444

[38] Beltrami E. Sulle funzioni bilineari, Giomale di Mathematiche ad Uso Studenti Delle Uninersita. 1873, 11: 98~106. An English translation by D Boley is available as University of Minnesota, Department of Computer Science, Technical Report 90-37, 1990

[39] Ben-Israel H, Greville T N E. Generalized Inverses: Theory and Applicationd. New York: Wiley-Interscience, 1974

[40] Berberian S K. Linear Algebra. New York: Oxford University Press, 1992

[41] Beufays F. Transform-domain adaptive filters: An analytical approach. IEEE Trans Signal Processing, 1995, 42: 422~431

[42] Biemvenu G, Kopp L. Principè de la goniomgraveetre passive adaptive. Proc 7'eme Colloque GRESIT, Nice Frace, 1979, 106/1~106/10

[43] Bierman G J. Factorization Methods for Discrete Sequential Estimation. New York: Academic, 1977

[44] Bischof C H. Incremental condition estimation. SIAM J Matrix Anal Appl, 1990, 11: 312~322

[45] Bischof C H, Shroff G M. On updating signal processing. IEEE Trans Signal Processing, 1992, 40: 96~105

[46] Björck A. Solving linear least-squares problems by Gram-Schmidt orthogonalization. BIT, 1967, 7: 1~21

[47] Björck A. Numerical Methods for Least Squares Problems. Philadelphia: SIAM, 1996

[48] Björck A, Bowie C. An iterative algorithm for computing the best estimate of an orthogonal matrix. SIAM J Num Anal, 1971, 8: 358~364

[49] Bobrow J E, Murray W. An algorithm for RLS identification of parameters that vary quickly with time. IEEE Trans Automatic Control, 1993, 38: 351~354

[50] Bodewig E. Comparison of some direct methods for computing determinants and inverse matrices. Proceedings of the Section of Sciences, 1947, 50: 49~57

[51] Bodewig E. Matrix Calculus. 2nd ed. Amsterdam: North-Holland, 1959

[52] Boot J. Computation of the generalized inverse of singular or ractangular matrices. Amer Math Monthly, 1963, 70: 302~303

[53] Boray G K, Srinath M D. Conjugate gradient techniques for adaptive filtering. IEEE Trans Circuits and Systems, 1992, 39: 1~10

[54] Bouchard M. Multichannel affine and fast affine projection algorithms for active noise control and acoustic equlization systems. IEEE Trans Speech and Audio Processing, 2003, 11(1): 54~60

[55] Box G E P, Jenkins G M. Time Series Analysis: Forecasting and Control. San Francisko, CA: Holden-Day, 1976

[56] Bradbury W W, Fletcher R. New iterative methods for solution of the eigenproblem. Numerische Mathematik, 1966, 9: 259~266

[57] Brandwood D H. A complex gradient operator and its application in adaptive array theory. Proc Inst Elec Eng, 1983, 130: 11~16

[58] Branham R L. Total least squares in astronomy. In: Van Huffel S ed. Recent Advances in Total Least Squares Techniques and Error-in-Variables Modeling. Philadelphia, PA: SIAM, 1997

[59] Bresler Y, Macovski A. Exact maximum likelihood parameter estimation of superimposed exponential signals in noise. IEEE Trans Acoust., Speech, Signal Processing, 1986, 34: 1081~1089

[60] Brewer J W, Kronecker products and matrix calculus in system theory. IEEE Trans Circuits and Systems, 1978, 25: 772~781

[61] Bridges T J, Morris P J. Differential eigenvalue problems in which the parameters appear nonlinearly. J Comput Phys, 1984, 55: 437~460

[62] Brockwell P J, Davis R A. Time Series: Theory and Methods. New York: Springer-Verlag, 1987

[63] Buckley A. On the solution of certain skew symmetric linear systems. SIAM J. Numer Anal, 1977, 14: 566~570

[64] Buckley K M, Xu X L. Spatial-spectrum estimation in a location sector. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1990, 38(11): 1842~1852

[65] Bunch J R, Nielsen C P, Sorensen D C. Rank-one modification of the symmetric eigenproblem. Numer Math, 1978, 31: 31~48

[66] Bunch J R, Nielsen C P. Updating the singular value decomposition. Numer Math, 1978, 31: 111~129

[67] Bunch J. Stability of methods for solving Toeplitz systems of equations. SIAM J Sci Stat Comput, 1985, 6: 349~364

[68] Bunse-Gerstner A. An analysis of the HR algorithm for computing the eigenvalues of a matrix. Linear Algebra and Its Applications, 1981, 35: 155~173

[69] Burrus C S, Soewito A W, Gopinath R A. Least squares error FIR filter design with transition bands. IEEE Trans Signal Processing, 1992, 40: 1327~1340

[70] Cadzow J A. Spectral estimation: An overdetermined rational model equation approach. Proc IEEE, 1982, 70: 907~938

[71] Cadzow J A. Signal enhancement: A composite property mapping algorithm. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1988, 36: 49~62

[72] Cardoso J F, Souloumiac A. Blind beamforming for non-Gaussian signals. Proc IEE, F, 1993, 140(6): 362~370

[73] Cardoso J F, Laheld B. Equivariant adaptive source separation. IEEE Trans Signal Processing, 1996, 44: 3017~3030

[74] Champagne B. Adaptive eigendecomposition of data covariance matrices based on first-order perturbations. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42: 2758~2770

[75] Chan T F. An improved algorithm for computing the singular value decomposition. ACM Trans Math Software, 1982, 8: 72~83

[76] Chan Y T, Wood J C. A new order determination technique for ARMA processes. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1984, 32: 517~521

[77] Chan R H, Ng M K. Conjugate gradient wethods for Toepilitz systems. SIAM Review, 1996, 38(3): 427~482

[78] Chandran V, Elgar S L. Pattern recognition using invariants defined from higher-order spectra — One-dimensional inputs. IEEE Trans Signal Processing, 1993, 41: 205~212

[79] Chang P S, Willson A N. Analysis of conjugate gradient algorithms for adaptive filtering. IEEE Trans Signal Processing, 2000, 48(2): 409~418

[80] Chansarkar M M, Desai U B. A robust recursive least squares algorithm. In: Proc IEEE ICASSP, 1993, 3: 432~435

[81] Chatelin F. Eigenvalues of Matrices. New York: Wiley, 1993

[82] Chen B, Petropulu A P. Frequency domain blind MIMO system identification based on second- and higher oreder statistics. IEEE Trans Signal Processing, 2001, 49(8): 1677~1688

[83] Chen H, Sarkar T K, Brule J, Dianat S A. Adaptive spectral estimation by the conjugate graient method. IEEE Trnas Acoust, Speech, Signal Processing, 1986, 34(2): 272~284

[84] Chen W, Chen M, Zhou J. Adaptively regularized constrained total least-squares image restoration. IEEE Trans Image Processing, 2000, 9(4): 588~596

[85] Chow J A. On estimating the orders of an ARMA process with uncertain observations. IEEE Trans Automatic Control, 1972, 17: 707~709

[86] Chu M T. Inverse eigenvalue problems. SIAM Review, 1998, 40(1): 1~39

[87] Chu D, Lathauwer L D, De Moore B. On the computation of the restricted singular value decomposition via cosine-sine decomposition. SIAM J Matrix Anal Appl, 2000, 22(2): 580~601

[88] Chua L O. Dynamic nonlinear networks: State-of-the-art. IEEE Trans Circuits and Systems, 1980, 27: 1024~1044

[89] Chui C, Chan A. Application of approximation theory methods to recursive digital filter design. IEEE Trans Acoust., Speech, Signal Processing, 1982, 30: 18~24

[90] Cichocki A, Amari S, et al. Self-adaptive neural networks for blind separation of sources. In: Proc 1996 International Symp. on Circuits and Systems. New York: IEEE Press, 2001, 5: 157~160

[91] Cioffi J M, Kalaith T. Fast recursive least squares filters for adaptive filtering. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1984, 32: 304~317

[92] Cioffi J M. Limited precision effects in adaptive filtering. IEEE Trans Circuits and Systems, 1987, 34: 821~833

[93] Cioffi J M. The fast Householder filters RLS adaptive filter. In: Proc IEEE ICASSP-90, New Mexico, 1990, 1619~1622

[94] Cioffi J M. The fast adaptive ROTOR's RLS algorithm. IEEE Trans Acoust., Speech, Signal Processing, 1990, 38: 631~653

[95] Cirrincione G, Cirrincione M, Herault J, et al. The MCA EXIN neuron for the minor component analysis. IEEE Trans Neural Networks, 2002, 13(1): 160~187

[96] Clark J V, Zhou N, Pister K S J. Modified nodal analysis for MEMS with multi-energy domains. In: International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, Semiconductors, Sensors and Actuators. San Diego, USA, 2000; also available at http: //www-bsac.EECS. Berkely.EDU/-cfm/publication.html

[97] Clark M P, Scharf L L. On the complexity of IQML algorithms. IEEE Trans Signal Processing, 1982, 40: 1811~1813

[98] Cline R E. Note on the generalized inverse of the product of matrices. SIAM Review, 1964, 6: 57~58

[99] Cline A K, Moler C B, Stewart G W, Wilkinson J H. An estimate for the condition number of a matrix. SIAM J Numer Anal, 1979, 16: 368~375

[100] Cohen A. Biomedical Signal Processing, Vol1, Boca Baton, FL: CRC, 1986

[101] Comon P, Golub G H. Tracking a few extreme singular values and vectors in signal processing. Proc IEEE, 1990, 78: 1327~1343

[102] Comon P. Independent component analysis: A new concept? Signal Processing, 1994, 36(3): 287~314

[103] Comon, P, Moreau, E. Blind MIMO equalization and joint-diagonalization criteria. Proc 2001 IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP '01), 2001, 5: 2749~2752

[104] Cruce S, Cichocki A, Castedo L. An iterative inversion approach to blind source separation. IEEE Trans Neural Networks, 2000, 11: 1423~1437

[105] Dai H. An algorithm for symmetric generalized inverse eigenvalue problems. Linea Algebra and Its Application, 1999, 296: 79~89

[106] Davis C, Kahan W M. The rotation of eigenvectors by a perturbation III. SIAM J Nume Anal, 1970, 7: 1~46

[107] Davis P. Circular Matrices. New York: John Wiley, 1979

[108] Davis G. A fast algorithm for inversion of block Toeplitz Signal Processing, 1995, 43: 3022~3025

[109] Davila C E. An efficient recursive total least squares algorithm for FIR adaptive filtering. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42(2): 268~280

[110] Davila C E. A subspace approach to estimation of autoregressive parameters from noisy measurements, IEEE Trans Signal Processing, 1998, 46: 531~534

[111] De Moor B, Golub G H. The restricted singular value decomposition: Properties and Applications. SIAM J Matrix Anal Appl, 1991, 12: 401~425

[112] De Moor B. Structured total least squares and L_2 approxination problems. In: Van Dooren, et al eds. Linear Algebra and its Applications, Special Issue on Numerical Linear Algebra Methods in Control, Signal and Systems, 1993, 163~207

[113] De Moor B, Overschee P V, and Schelfhout G. H_2-model reduction for SISO systems. In: Proc 12th World Cong Int Fed Automat Contr, Australia: Sydney, 1993, 2: 227~230

[114] De Moor B. Total least squares for affine structured matrices and the noisy realization problem. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42: 3104~3113

[115] Debreu G. Definite and semidefinite quadratic forms. Econometrica, 1952, 20: 295~300

[116] Decell Jr. H P. An application of the Cayley-Hamilton theorem to generalized matrix inversion. SIAM Review, 1965, 7(4): 526~528

[117] DeGroat R D, Roberts R A. Efficient, numerically stablized rank-one eigenstructure updating. IEEE Trans Acoust., Speech, Signal Processing, 1990, 38: 301~316

[118] DeGroat R D, Roberts R A. SVD update algorithms and spectral estimation application. In: Proc 19th Asilomar Conf Circuits, Syst, Comput, 1995, 601~605

[119] Deherty J, Porayath R. A robust echo canceler for acoustic environments. IEEE Trans Circuits and Systems Ⅱ: Analog and Digital Signal Processing, 1997, 44: 389~398

[120] Delsarte P, Genin Y. The split Levinson algorithm. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1986, 34: 47~478

[121] Delsarte P, Genin Y. On the splitting of classical algorithms in linear prediction theory. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1987, 35: 645~653

[122] Demmel J, Kahan W, Accurate singular values of bidiagonal matricse. SIAM J Sci Statis Comput, 1990, 11: 873~912

[123] Demmel J, Veselic K, Jacobi's method is more accurate than QR. SIAM J Matrix Anal Appl, 1992, 13(4): 1204~1245

[124] Demoment G. Image reconstruction and restoration: Overview of common estimation problems. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1989, 37(12): 2024~2036

[125] Dentino M, McCool J, Widrow B. Adaptive filtering in the frequency domain. Proc IEEE, 1978, 66: 1658~1659

[126] Deutsch E. On matrix norms and logarithmic norms. Numer Math, 1975, 24: 49~51

[127] Deherty J, Porayath R. A robust echo canceler for acoustic environments. IEEE Trans Circuits and Systems Ⅱ: Analog and Digital Signal Processing, 1997, 44: 389~398

[128] Doclo S, Moonen M. GSVD-based optimal filtering for single and multimicrophone speech enhancement. IEEE Trans Signal Processing, 2002, 50(9): 2230~2244

[129] Dogancay K, Tanrikulu O. Adaptive filtering algorithms with selecting partial updates. IEEE Trans Circuits and Systems Ⅱ: Analog and Digital Signal Processing, 2001, 48(8): 762~769

[130] Douglas S C, Cichocki A. Adaptive step size techniques for decorrelation and blind source separation. In: Proc 32nd Asilomar Conf on Signals, Systems and Computers. New York: IEEE Press, 1998, 2: 1191~1195

[131] Dowling E M, Ammann L P, Shamsunder S. A TQR-iteration based adaptive SVD for real time angle and frequency tracking. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42: 914~926

[132] Doyle J C. Analysis of feedback systems with structured uncertainties. Proc IEE, 1982, 129: 242~250

[133] Doyle J C, Wall J E, Stein G. Performance and robustness analysis for structured uncertainty. In: Proc 21st IEEE Conf Decision Contr, 1982, 629~636

[134] Drmac Z. Accurate computation of the product-induced singular value decomposition with applications. SIAM J Numer Anal, 1998, 35(5): 1969~1994

[135] Drmac Z. A tangent algorithm for computing the generalized singular value decomposition. SIAM J Numer Anal, 1998, 35(5): 1804~1832

[136] Drmac Z. New accurate algorithms for singular value decomposition of matrix triplets. SIAM J Matrix Anal Appl, 2000, 21(3): 1026~1050

[137] Dubrulle A A. Householder transformations revisited. SIAM J Matrix Anal Appl, 2000, 22(1): 33~40

[138] Duda R O, Hart P E. Pattern Classification and Scene Analysis. New York: Wiley, 1973

[139] Duncan W J. Some devices for the solution of large sets of simultaneous linear equations. The London, Edinburgh, anf Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, Seventh Series, 1944, 35: 660~670

[140] Eckart C, Young G. The approximation of one matrix by another of lower rank. Psychometrica, 1936, 1: 211~218

[141] Eckart C, Young G. A Principal axis transformation for non-Hermitian matrices. Null Amer. Math. Soc., 1939, 45: 118~121

[142] Edelman A, Arias T A, Smith S T. The geometry of algorithms with orthogonality constraints. SIAM J. Matrix Analysis, Applications, 1998, 20(2): 303~353

[143] Efroymson G, Steger A, Steeinberg S. A matrix eigenvalue problem. SIAM Review, 1980, 22(1): 99~100

[144] Eisenstat S C, Ipsen I C F. Relative perturbation techniques for singular value problems. SIAM J Numer Anal, 1995, 32(6): 1972~1988

[145] Eldar Y C, Oppenheim A V. MMSE whitening and subspace whitening. IEEE Trans Inform Theory, 2003, 49(7): 1846~1851

[146] Eldar Y C, Opeenheim A V. Orthogonal and projected orthogonal matched filter detection. Signal Processing, 2004, 84: 677~693

[147] Elhay S, Gladwell G M L, Golub G H, Ram Y M. Om some cigenvector-eigenvalue relations. SIAM J Matrix Anal Appl, 1999, 20(3): 563~574

[148] Ewerbring L M, Luk F T. Canonical correlations and generalized SVD: Applications and new algorithms. J Comput Appl Math, 1989, 27: 37~52

[149] Faddeev D K, Faddeeva V N. Computational Methods of Linear Algebra. San Francisco: W H Freedman Co, 1963

[150] Fan M K H, Tits A L. Characterization and efficient computation of the structed singular values. IEEE Trans Automatic Control, 1986, 31: 734~743

[151] Farina A, Golino G, Timmoneri L, Comparison between LS and TLS in adaptive processing for radar systems. IEE P-Radar Sonar Nav, 2003, 150(1): 2~6

[152] Feng D Z, Zhang X D, Bao Z, An efficient multistage decomposition approach for independent components. Signal Processing, 2003, 83: 181~197

[153] Fernando K V, Hammarling S J. A product induced singular value decomposition (PSVD) for two matrices and balanced relation. In: Proc Conference on Linear Algebra in Signals, Systems and Controls, Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM). PA: Philadelphia, 1988, 128~140

[154] Fevotte C, Doucarli C. Two contributions to blind source separation using time-frequency distributions. IEEE Sigual Processing Letters, 2004, 11(3): 386~389

[155] Fino B J, Algazi V R. A unified treatment of discrete fast unitary transforms. SIAM J Comput, 1971, 6: 700～717

[156] Fletcher R. Conjugate gradient methods for indefinite systems. In: Watson G A. ed. Proc Dundee Conf on Num Anal . New York: Springer-Verlag, 1975, 73～89

[157] Forsgren A, Gill P E, Wright M H. Interior methods for nonlinear optimization. SIAM Review, 2002, 44: 525～597

[158] Forsgren A. Inertia-controlling factorization for optimization algorithms. Appl Numer Math, 2002, 43: 91～107

[159] Forsythe G E, Henrici P. The cycle Jacobi method for computing the principal values of a complex matrix. Trans Amer Math Soc, 1960, 94: 1～23

[160] Fu Z, Dowling E M. Conjugate gradient eigenstructure tracking for adaptive spectral estimation. IEEE Trans Signal Processing, 1995, 43: 1151～1160

[161] Fuhrmann D R. An algorithm for subspace computation with applications in signal processing. SIAM J Matrix Anal Appl, 1988, 9: 213～220

[162] Fukunaga K. Statistical Pattern Recognition. 2nd ed. New York: Academic Press, 1990

[163] Galatsanou N P, Katsaggelos A K. Methods for choosing the regularization parameter and estimating the noise variance in image restoration and their relation. IEEE Trans Image Processing, 1992, 1(3): 322～336

[164] Gao K, Ahmad M O, Swamy M N S. A constrainted anti-Hebbian learning algorithm for total least-squares estimations with application to adaptive FIR and IIR filtering. IEEE Trans Circuits and Systems Ⅱ: Analog and Digital Signal Processing, 1994, 41(11): 718～729

[165] Gander W, Golub G H, Von Matt U. A constrained eigenvalue problem. Linear Algebra Appl, 1989, 114-115: 815～839

[166] Gantmacher F R. Applications of the Theory of Matrices. New York: Interscience, 1959

[167] Gantmacher F R. The Theory of Matrices. Chelsea Publishing, 1977

[168] Gay S L, Tavathia S. The fast affine projection algorithm. In: Int Conf Acoustic, speech, Signal Processing, 1995, 3023～3026

[169] Gersch W. Estimation of the autoregressive parameters of a mixed autoregressive moving-averaging time series. IEEE Trans Automatic Control, 1970, 15: 583～585

[170] Gharieb R R, Cichocki A. Second-order statistics based blind source separation using a bank of subband filters. Digital Signal Processing, 2003, 13: 252～274

[171] Giannakis G B, Mendel J M. Cumulant-based order determination of non-Gaussian ARMA models. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1990, 38: 1411～1422

[172] Giannakis G B. On the identifiability of non-Gaussian ARMA models using cumulants. IEEE Trans Automatic Control, 1990, 35: 18～26

[173] Gillies A W. On the classfication of matrix generalized inverse. SIAM Review, 1970, 12(4): 573～576

[174] Givens W. Computation of plane unitary rotations transforming a general matrix to triangular form. SIAM J. Applied Math., 1958, 6: 26～50

[175] Glentis G O, Berberidis K, Theodoridis S. Efficient least squares adaptive algorithms for FIR transversal filtering. IEEE Signal Processing Magazine, 1999, 16(4): 13~41

[176] Gleser L J. Estimation in a multivariate "errors in variables" regression model: large sample results. Ann. Statist., 1981, 9: 24~44

[177] Gohberg I, Lancaster P, Rodman L. Matrix Polynomials. New York: Academic Press, 1982

[178] Goldstein J S, Reed I S. Reduced-rank adaptive filter. IEEE Trans Signal Processing, 1997, 45(2): 492~496

[179] Golub G H, Reinsch C. Singular Value Decomposition and Least Squares Solutions. Numer Math, 1970, 14: 403~420

[180] Golub G H. Some modified matrix eigenvalue problems. SIAM Review, 1973, 15: 318~334

[181] Golub G H, Pereyra V. The differentiation of pseudoinverses and nonlinear least squares problems whose variables separate. SIAM J. Numer Anal, 1973, 10: 413~432

[182] Golub G H, Van Loan C F. An analysis of the total least squares problem. SIAM J. Numer Anal, 1980, 17: 883~893

[183] Golub G H, Klema V, Stewart G W. Rank degeneracy and least squares problems. Technical Report TR-456, Dept Computer Science, University of Maryland, College Park, MD, 1986

[184] Golub G H, Van Loan C F. Matrix Computation. 2nd ed. Baltimore: The John Hopkins University Press, 1989

[185] Goodwin G C, Sin K S. Adaptive Filtering Prediction and Control. New York: Prentice-Hall, 1984

[186] Gould N I M. On practical conditions for the existing quadratic programming problems. Math Program, 1985, 32: 90~99

[187] Grassmann H G. Die Ausdehnungslehre. Berlin: Enslin, 1862

[188] Gray R M. On the asymptotic eigenvalue distribution of Toeplitz matrices. IEEE Trans Information Theory, 1972, 18(6): 267~271

[189] Graybill F A. An Introduction to Linear Statistical Models, Vol1, New York: McGraw-Hill, 1961

[190] Graybill F A, Meyer C D, Painter R J. Note on the computation of the generalized inverse of a matrix. SIAM Review, 1966, 8(4): 522~524

[191] Graybill F A. Matrices with Applications in Statistics. Balmont CA: Wadsworth International Group,1983

[192] Green B. The orthogonal approximation of an oblique structure in factor analysis. Psychometrika, 1952, 17: 429~440

[193] Greville T N E. Some applications of the pseudoinverse of a matrix. SIAM Review, 1960, 2: 15~22

[194] Greville T N E. Note on the generalized inverse of a matrix product. SIAM Review, 1966, 8(4): 518~521

[195] Griffiths J W. Adaptive array processing: A tutorial. Proc IEE, Part F, 1983, 130: 137~142

[196] Guttman L. Enlargement methods for computing the inverse matrix. Ann Math Statist, 1946, 17: 336~343

[197] Hager W W. Updating the inverse of a matrix. SIAM Review, 1989, 31(2): 221∼239

[198] Hahn W. Stability of Motion. Springer-Verlag, 1967

[199] Haimi-Cohen R, Cohen A. Gradient-type algorithms for partial singular value decomposition. IEEE Trans Pattern Anal Machine Intell, 1987, 9: 137∼142

[200] Halmos P R. Finite Deimensional Vector Spaces. New York: Springer-Verlag, 1974

[201] Hanchez Y, Dooren P V. Elliptic and hyperbolic quadratic eigenvalue problems and associated distance problems. Linear Algebra and Its Applications, 2003, 371: 31∼44

[202] Hanson R J, Lawson C L. Extension and applications of the Householder algorithm for solving linear least squares problems. Math Comput, 1969, 108: 787∼812

[203] Hanzon B. The area enclosed by the (oriented) Nyquist diagram and the Hilbert-Schmidt-Hankel norm of a linear system. IEEE Trans Automatic Control, 1992, 37: 835∼839

[204] Hartman P. On completely continous Hankel matrices. Proc Amer Math Soc, 1958, 9: 862∼866

[205] Harville D A. Extension of the Gauss-Markov theorem to include the estimation of random effects. Ann Staist, 1976, 4: 384∼395

[206] Haykin S. Neural Networks: A Comprehensive Foudation. New York: Macmillan College Publishing Company, Inc, 1994

[207] Haykin S. Adaptive Filter Theory. 3rd ed. Prentice Hall, 1996

[208] Heath M T, Laub A J, Paige C C, Ward R C. Computing the SVD of product of two matrices. SIAM J Sci Stat Comput, 1986, 7: 1147∼1159

[209] Heeg R S, Geurts B J. Spatial instabilities of the incompressible attachment-line flow using sparse matrix Jacobi-Davidson techniques. Appl Sci Res, 1998, 59: 315∼329

[210] Hejj C. Deterministic Identification of Dynamical Systems (Lecture Notes in Control and Information Sciences), Vol127. Berlin: Springer-Verlag, 1989

[211] Helmke U, Moore J B. Optimization and Dynamical Systems. London, UK: Springer-Verlag, 1994

[212] Helmgren S, Otto K. Iterative solution methods and precondioners for block-tridiagonal systems of equations. SIAM J Matrix Anal Appl, 1992, 13: 863∼886

[213] Hendeson H V, Searle S R. On deriving the inverse of a sum of matrices. SIAM Review, 1981, 23: 53∼60

[214] Henderson H V, Searle S R. The vec-permutation matrix, the vec operator and Kronecker products: A review. Linear and Multilinear Algebra, 1981, 9: 271∼288

[215] Hestenes M R, Stiefel E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. J Res National Bureau of Standards, 1952, 49: 409∼436

[216] Hestenes M R. Inversion of matrices by biagonalization and related results. J Soc Indust Appl Math., 1958, 6: 51∼90

[217] Hestenes M. Conjugate Direction Methods in Optimization. New York: Springer-Verlag, 1980

[218] Higham N J. Efficient algorithms for computing the condition number of a tridiagonal matrix. SIAM J Scientific Stat Computing, 1986, 7: 150∼165

[219] Higham N J. Computing the polar decomposition — with applications. SIAM J Sci Stat Comp, 1986, 7: 1160~1974

[220] Hinamoto T, Maekawa S. Extended theory of learning identification (in Japanese). Trans Inst Elect Eng Jpn, 1975, 95(10): 227~234

[221] Hochstenbach M E. A Jacobi-Davidson type SVD method. SIAM J Sci Comput, 2001, 23(2): 606~628

[222] Hodges S D, and Moore P G. Data uncertainties and least squares regression, Applied Statistics, 1972, 21: 185~195

[223] Honig M L, Madhow U, Verdu S. Blind adaptive multiuser detection. IEEE Trans Inform Theory, 1995, 41: 944~960

[224] Horn R A, Johnson C R. Matrix Analysis. Cambridge: Cambridge University Press, 1985

[225] Horn R A, Johnson C R. Topics in Matrix Analysis. Cambridge: Cambridge University Press, 1991

[226] Hotelling H. Analysis of a complex of statistical variables into principal components. J Educ Psychol, 1933, 24: 417~441

[227] Hotelling H. Some new methods in matrix calculation. Ann Math Statist, 1943, 14: 1~34

[228] Hotelling H. Further points on matrix calculation and simultaneous equations. Ann Math Statist, 1943, 14: 440~441

[229] Householder A S. Unitary triangularization of a non-symmetric matrix. J Assoc Comput Mach, 1958, 5: 339~342

[230] Householder A S. The Theory of Matrices in Numerical Analysis. London: Dover, 1964

[231] Howland P, Jeon M, Park H. Structure preserving dimension reduction for clustered text data based on the generalized singular value decomposition. SIAM J Matrix Anal Appl, 2003, 25(1): 165~179

[232] Huang B. Detection of abrupt changes of total least squares models and application in fault detection. IEEE Trans Control Systems Technology, 2001, 9(2): 357~367

[233] Huffel S V, Vandewalle J. The Total Least Squares Problems: Computational Aspects and Analysis. Fronties Appl Math 9, Philadelphia: SIAM, 1991

[234] Hyland D C, Bernstein D S. The optimal projection equations for model reduction and the relationships among the methods of Wilson, Skelton and Moore. IEEE Trans Automatic Control, 1985, 30: 1201~1211

[235] Jacobi C G J. Über ein leichtes verfahren, die in der theorie der säkularstörungen vorkommenden gleichungen numeirisch aufzulösen. J Reine Angew Math, 1846, 30: 51~95

[236] Jain S K, Gunawardena A D. Linear Algebra: An Interactive Approach. Thomson Learning, 2003

[237] Jakobsson A, Swindlehurst A L, Stoica P. Subspace-based estimation of time delays and Doppler shifts. IEEE Trans Signal Processing, 1998, 46(9): 2472~2483

[238] Jennings A, McKeown J J. Matrix Computations. New York: John Wiley & Sons, 1992

[239] Johnson D H, Dudgeon D E. Array Signal Processing: Concepts and Techniques. Englewood Cliffs, NJ: PTR Prentice Hall, 1993

[240] Johnson L W, Riess R D, Arnold J T. Introduction to Linear Algebra. 5th ed. New York: Prentice-Hall, 2000

[241] Jordan C. Memoire sur les formes bilineaires. J Math Pures Appl, Deuxieme Serie, 1874, 19: 35~54

[242] Joseph K T. Inverse eigenvalue problem in structural design, AIAA J, 1992, 30: 2890~2896

[243] Kailath T, Vieira A, Morf M. Inverses of Toeplitz operators, innovations, and orthogonal polymials. SIAM Review, 1978, 20: 106~119

[244] Kantorovich L V. Function analysis and applied mathematics. Uspekhi Mathematicheskikh Nauk, 1948, 3: 89~185. Translated from Russian by C D Benster, National Bureau of Standards, Report 1509, 7 March 1952

[245] Karasalo I. Estimating the covariance matrix by signal subspace averaging. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1986, 34: 8~12

[246] Karhunen J. Adaptive algorithms for estimating eigenvectors of covariance type matrices. In: Proc ICASSP-84, 1984, 14.6.1~14.6.4

[247] Kato T. A Short Introduction to Perturbation Theory for Linear Operators. New York: Springer-Verlag, 1982

[248] Kay S M. Modern Spectral Estimation: Theory and Applications. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1988

[249] Kayalar S, Weinert H L. Error bound for the method of alternating projections. Math. of Control, Signals, and Systems, 1988, 1(1): 43~59

[250] Kayalar S, Weinert H L. Oblique projections: Formulas, algorithms, and error bounds. Math of Control, Signals, and Systems, 1989, 2(1): 33~45

[251] Khatri C G. Some results for the singular multivariate regression models. Sankya, Series A, 1968, 30: 267~280

[252] Khatri C G, Rao C R. Solutions to some functional equations and their applications to characterization of probability distributions. Sankhya: The Indian J Stat, Series A, 1968, 30: 167~180

[253] Kiendl H, Adamy J, Stelzner P. Vector norms as Lyapunov functions for linear systems. IEEE Trans Automatic Control, 1992, 37: 839~842

[254] Kimura H, Honoki Y. A hybrid approach to high resolution two-dimensional spectrum analysis. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1987, 35: 1024~1036

[255] KingR, Ahmeadi M, Gorgui-Naguib R, Kwabwe A, Azimi-Sadiadi M. Digital Filtering in one and two dimensions: Design and Applications. New York: Plenum, 1989

[256] Klema V C, Laub A J. The singular value decomposition: Its computation and some applications. IEEE Trans Automatic Control, 1980, 25: 164~176

[257] Klemm R. Adaptive airborne MTI: An auxiliary channel approach. Proc IEE, Part F, 1987, 134: 269~276

[258] Klein J D, Dickinson B W. A normalized ladder form of residual energy ratio algorithm for PARCOR estimation via projections. IEEE Trans Automatic Control, 1983, 28: 943~952

[259] Kogbetliantz E G. Solution of linear equations by diagonalization of coefficients matrix. Quart Appl Math, 1955, 13: 123~132

[260] Komzsik L. Implicit computational solution of generalized quadratic eigenvalue problems. Finite Elemnets in Analysis and Design, 2001, 37: 799~810

[261] Krabill D M. On extension of Wronskian matrices. Bell Amer Math Soc, 1943, 49: 593~601

[262] Krishna H, Morgera S D. The Levinson recurrence and fast algorithms for solving Toeplitz systems of linear equations. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1987, 35: 839~847

[263] Kumar R. A fast algorithm for solving a Toeplitz system of equations. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1985, 33: 254~267

[264] Kumaresan R. Estimating the paramaters of exponentially damped or undamped sinusoidal signals in noise: [Ph.D. dissertation]. RI: University of Rhode Island, 1982

[265] Kumaresan R, Tufts D W. Estimating the angle of arrival of multiplc plane waves. IEEE Trans Aerospace Electron Syst, 1983, 19: 134~139

[266] Kumaresan R. Rank reduction techniques and burst error-correction decoding in real/complex fields. In: Proc Nineteenth Asilomar Conf Circuits Syst Comput CA: Pacific Grove, 1985

[267] Kung S Y. Digital Neural Processing. Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1993

[268] Kusner H, Yin G. Stochastic Approximation Algorithms and Applications. Springer, 1997

[269] Lancaster P. Lambda-Matrices and Vibrating Systems. Oxford: Pergamon Press, 1966

[270] Lancaster P, Tismenetsky M. The Theory of Matrices with Applications. 2nd ed. New York: Academic, 1985

[271] Lancaster P. Quadratic eigenvalue problems. Linear Algebra Appl., 1991, 150: 499~506

[272] Larimore W E, Luk F T. System identification and control using SVD on systolic arrays, in High Speed Computing. Proc SPIE 880, Bellingham, WA, 1988, 37~48

[273] Laub A J, Heath M T, Paige C C, Ward R C. Computation of system balancing transformations and other applications of simultaneous diagonalization algorithms. IEEE Trans Automatic Control, 1987, 32: 115~122

[274] Lay D C. Linear Algebra and Its Applications, 2nd Edition. New York: Addison-Wesley, 2000

[275] Le Cadre J P. Parametric methods for spatial signal processing in the prosence of unknown colored noise fields. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1989, 37: 965~983

[276] Lee J C, Un C K. Performance of transform domain adaptive digital filters. IEEE Trans Acout, Speech, Signal Processing, 1986, ASSP-34: 499~510

[277] Lemmerling P, De Moor B, Van Huffel S. On the equivalence of constrained total least squares and structured total least squares. IEEE Trans Signal Processing, 1996, 44(11): 2908~2911

[278] Leonard I E. The matrix exponential. SIAM Review, 1996, 38(3): 507~512

[279] Levinson N. The Wiener RMS (root-mean-square) error criterion in filter sedign and prediction, J Math Phys, 1947, 25: 261~278

[280] Liao X, Bao Z. Circularly integrated bispectra: Novel shift invariant features for high-resolution radar target recognition. Electron Letters, 1998, 34: 1879~1880

[281] Liu Z S. QR methods of $O(N)$ complexity in adaptive parameter estimation. IEEE Trans Signal Processing, 1995, 43: 720~729

[282] Ljung L, Söderström T. Theory and Practice of Recursive Identification. MIT Press, 1982

[283] Ljung S, Ljung L. Error propagation properties of recursive least squares adaption algorithms. Automatica, 1985, 21: 157~167

[284] Ljung L, Pflug G, Walk H. Stochastic Approximation and Optimization of Random Systems, Birkhauser Verlag, 1992

[285] Lorch E R. On a calculus of operators in reflexive vector spaces. Trans Amer Math Soc, 1939, 45: 217~234

[286] Lou S T, Zhang X D (张贤达). Fuzzy-based learning rate determination for blind source separation. IEEE Trans Fuzzy Systems, 2003, 11(3): 375~383

[287] Lueberger D. An Introduction to Linear and Nonlinear Programming. MA: Addison-Wesley, 1973

[288] Luenberger D D. Linear and Nonlinear Programming. 2nd ed. London: Addison-Wesley, 1984

[289] Luo FL, Unbehauen R, Cichocki A. A minor component analysis algorithm. Neural networks, 1997, 10(2): 291~297

[290] Lütkepohl H. Handbook of Matrices. New York: John Wiley & Sons, 1996

[291] Lyantse V E. Some properties of idempotent operators. Troret i Prikl Mat, 1958, 1: 16~22

[292] Luenberger D G. Linear and Nonlinear Programming. 2nd ed. Reding, MA: Addison-Wesley, 1984

[293] Macchi O M, Bershad N J. Adaptive recovery of a chirped sinusoid in noise. Part I: Performance of the RLS algorithm, IEEE Trans Signal Processing, 1991, 39: 583~594

[294] MacDuffee C C. The Theory of Matrices. Berlin: Springer-Verlag, 1933

[295] Magnus J R, Neudecker H. The commutation matrix: Some properties and applications. Ann Ststist, 1979, 7: 381~394

[296] Magnus J R, Neudecker H. Matrix Differential Calculus with Applications in Statistics and Econometrics. Revised ed. Chichester: Wiley 1999

[297] Makhoul J. Toeplitz determinants and positive semidefiniteness. IEEE Trans Signal Processing, 1991, 39: 743~746

[298] Manolakis D G, Ingle V K, Kogon S M. Statistical and Adaptive Signal Processing. Boston: McGraw-Hill, 2000

[299] Marcus M, Minc H. A survey of Matrix Theory and Matrix Inequalities. Boston: Allyn and Bacon, 1964

[300] Mardia K V, Kent J T, Bibby J M. Multivariate Analysis. London: Academic, 1979

[301] Marshall Jr. T G. Coding of real-number sequences for error correction: A digital signal processing problem. IEEE J Select Areas Commun, 1984, 2(2): 381~392

[302] Mastronardi N, Lemmerling P, Van Huffel S V. Fast structured total least squares algorithm for solving the basic deconvolution problem. SIAM J Matrix Anal Appl, 2000, 22(2): 533~553

[303] Mathew G, Reddy V. Development and analysis of a neural network approach to Pisarenko's harmonic retrieval method. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42: 663~667

[304] Mathew G, Reddy V. Orthogonal eigensubspaces estimation using neural networks. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42: 1803~1811

[305] Matsutani H, Nakagawa M. Multi-carrier DS-CDMA usi ng frequency spread coding. IEICE Trans Fundamentals, 1999, 82-A: 2634~2642

[306] Mboup M, Bonnet M, Bershad N. LMS coupled adaptive prediction and system identification: A statistical model and transient mean analysis. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42: 2607~2615

[307] McClellan J M, Lee D. Exact equivalence of the Steiglitz-McBride iteration and IQML. IEEE Trans Signal Processing, 1991, 39: 509~112

[308] Meerbergen K. Locking and restarting quadratic eigenvalue solvers. SIAM J Sci Comput, 2001, 22(5): 1814~1839

[309] Mendel J M. Some modeling problems in reflection seimology. IEEE ASSP Mag, 1986, 3(1): 4~17

[310] Mesarovic V Z, Galatsanos N P, Katsaggelos K. Regularized constrained total least squares image restoration. IEEE Trans Image Processing, 1995, 4(8): 1096~1108

[311] Miao Y, Hua Y. Fast subspace tracking and neural network learning by a novel information criterion. IEEE Trans Signal Processing, 1998, 46(7): 1967~1979

[312] Micka O J, Weiss A J. Estimating frequencies of exponentials in noise using joint diagonalization. IEEE Trans Signal Processing, 1999, 47(2): 341~348

[313] Mikhael W, Spanias A. Comparison of several frequency domain LMS algorithms. IEEE Trans Circuits and Systems, 1987, 34: 586~588

[314] Milliken G A, Akdeniz F. A theorem on the difference of the generalized inverses of two nonegative matrices. Communications in Statistics, 1977, A6: 73~79

[315] Mirsky L. Symmetric gauge functions and unitarily invariant norms. Quart J Math Oxford, 1960, 11: 50~59

[316] Moffatt D L, Mains R K. Detection and discrimination of radar targets. IEEE Trans Antennas Propagat., 1975, 23: 358~367

[317] Mohanty N. Random Signal Estimation and Identification. Van Nostrand Reinhold, 1986

[318] Moler C B, Stewart G W. An algorithm for generalized matrix eigenvalue problem, SIAM J Num Anal, 1973, 10: 241~256

[319] Moonen M, De Moor B, Vandenberghe L, Vandewalle J. On- and off-line identification of linear state space models. International J Control, 1989, 49(1): 219~232

[320] Moonen M, Dooren P V, Vandewalle J. A singular value decomposition updating algorithm for subspace tracking. SIAM J Matrix Anal Appl, 1992, 13: 1015~1038

[321] Moore E H. On the reciprocal of the general algebraic matrix. Bull Amer Math Soc, 1920, 26: 394~395

[322] Moore E H. General analysis, Part 1. Mem Amer Philos Sic, 1935, 1: 1

[323] Moreau E. A generalization of joint-diagonalization criteria for source separation. IEEE Trans Signal Processing, 2001, 49(3): 530~541

[324] Morgan R. Generalizations of Davidson's method for computing eigenvalues of large non-symmetric matrices. J Comput Phys, 1992, 101: 287~291

[325] Murata N, Muller K R, et al. Adaptive on-line learning in changing environments. In: Advances in NIPS'9. Cambridge: MIT Press, 1997, 599~605

[326] Murray F J. On complementary manifofolds and projections in L_p and l_p. Trans Amer Math Soc, 1937, 43: 138~152

[327] Narayan S, Peterson A M, Narasimha M J. Transform domain LMS algorithm. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1983, 31: 609~615

[328] Neagoe V E. Inversion of the Van der Monde Matrix. IEEE Signal Processing Letters, 1996, 3: 119~120

[329] Neudecker H. A matrix trace inequality. J. Mathema tical Analysis and Applications, 1992, 166: 302~303

[330] Nevelson M, Hasminskii R. Stochastic Approximation and Recursive Estimation. American Mathematical Society, 1973

[331] Newcombe R W. On the simultaneous diagonalization of two semidefinite matrices. Q Appl Math, 1960, 19: 144~166

[332] Ng L, Solo V. Error-in-variables modeling in optical fow estimation. IEEE Trans Image Processing, 2001, 10(10): 1528~1540

[333] Nguyen T Q. The design of arbitrary FIR digital filters using the eigenfilter method. IEEE Trans Signal Processing, 1993, 41: 1128~1139

[334] Nickel U. Radar target parameter estimation with anttena arrays. In: S Haykin, J Litva, and T J Shephard eds. Radar Array Processing, New York: Springer-Verlag, 1991

[335] Nievergelt Y. Total least squares: State-of-the-art regression in numerical analysis. SIAM Review, 1994, 36(2): 258~264

[336] Noble B, Danniel J W. Applied Linear Algebra. 3rd ed. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1988

[337] Nocedal J, Wright S J. Numerical Optimization. New York: Springer-Verlag, 1999

[338] Nour-Omid B, Parlett B N, Ericsson T, Jensen P S. How to implement the spectral transformation. Math Comput, 1987, 48: 663~673

[339] Oates J H. Application of degenerate perturbation theory to subspace tracking. IEEE Trans Signal Processing, 2000, 48(1): 92~101

[340] Ohsmann M. Fast cosine transform of Toeplitz matrices, algorithm and applications. IEEE Trans Signal Processing, 1993, 41: 3057~3061

[341] Oja E. A simplified neuron model as a principal component analyzer. J Math Bio, 1982, 15: 267~273

[342] Oja E, Karhunen J. On stochastic Approximation of the eigenvectors and eigenvalues of the expectation of a random matrix. J Math Anal Appl, 1985, 106: 69~84

[343] Oja E. The nonlinear PCA learing rule in independent component analysis. Neurocomputing, 1997, 17: 25~45

[344] Olson L, Vandini T. Eigenproblems from finite element analysis of fluid-structure interactions. Comput Struct, 1989, 33: 679~687

[345] Ottersten B, Asztely D, Kristensson M, Parkvall S. A statistical approach to subspace based estimation with applications in telecommunications. In: Van Huffel S ed. Recent Advances in Total Least Squares Techniques and Error-in-Variables Modeling, Philadelphia, PA: SIAM, 1997

[346] Ouyang S, Bao Z, Liao GS, et al. Adaptive minor component extraction with modular structure. IEEE Trans Signal Processing, 2001, 49(9): 2127~2137

[347] Owsley N L. Adaptive data orthogonalization. In: Proc ICASSP-78, 1978

[348] Ozeki K, Umeda T. An adaptive filtering algorithm using an orthogonal projection to an affine subspace and its properties (in Japanese). Electron Commun Jpn, 1984, 67-A: 126~132

[349] Paige C C, Saunders N A. Towards a generalized singular value decomposition. SIAM J Numer Anal, 1981, 18: 269~284

[350] Paige C C. Properties of numerical algorithms related to computing controllability. IEEE Trans Automatic Control, 1981, 26: 130~138

[351] Paige C C. Computing the generalized singular value decomposition. SIAM J Sci Stat Comput, 1986, 7: 1126~1146

[352] Pajunnen P, Karhunen J. Least-Squares methods for blind source Separation based on Nonlinear PCA. Int. J. of Neural Systems, 1998, 8: 601~612

[353] Papoulis A. Probability, Random Variables and Stochastic Processes. New York: McGraw-Hill, 1991

[354] Parlett B N. Analysis of algorithms for reflections in besectors. SIAM Review, 1971, 13: 197~208

[355] Parlett B N. The Rayleigh quotient iteration and some genelarizations for nonormal matrices. Mathematics of Computation, 1974, 28(127): 679~693

[356] Parlett B N. The Symmetric Eigenvalue Problem. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1980

[357] Pauli W. The Theory of Relativity. New York: McMillan, 1958

[358] Pavon M. New results on the interpolation problem for continue-time stationary-increments processes. SIAM J Control Optim, 1984, 22: 133~142

[359] Pearson K. On lines and planes of closest fit to points in space. Phil Mag, 1901, 559~572

[360] Pease M C. Methods of Matrix Algebra. New York: Academic Press, 1965

[361] Pei S C, Shyu J J. Designa of FIR Hilbert transformers and differentiators by eigenfilters, IEEE Trans Circuits Syst, 1988, 35: 1457~1461

[362] Pei S C, Shyu J J. Eigenfilter design of higher order digital differentiators. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1989, 37: 505~511

[363] Pei S C, Tseng C C. A new eigenfilter based on total least squares error criterion. IEEE Trans Circuits and Systems Ⅰ, 2001, 48(6): 699~709

[364] Penrose R A. A generalized inverse for matrices. Proc Cambridge Philos Soc, 1955, 51: 406~413

[365] Piegorsch W W, Casella G. The early use of matrix diagonal increments in statistical problems. SIAM Review, 1989, 31: 428~434

[366] Piegorsch W W, Casella G. Erratum: Inverting a sum of matrices. SIAM Review, 1990, 32: 470

[367] Pintelon R, Guillaume P, Vandersteen G, Rolain Y. Analyzes, development and applications of TLS algorithms in frequency domain system identification. In: Van Huffel S ed. Recent Advances in Total Least Squares Techniques and Error-in-Variable Modeling, Philadelphia, PA: SIAM, 1997

[368] Pisarenko V F. The retrieval of harmonics from a covariance function. Geophysics, J Roy Astron Soc, 1973, 33: 347~366

[369] Poularikas A D. The Handbook of Formulas and Tables for Signal Processing. New YorK: CRC Press, Springer, IEEE Press, 1999

[370] Powell M J D. Convergence properties of algorithms for nonlinear optimization. SIAM review, 1986, 28: 487~500

[371] Price C. The matrix pseudoinverse and minimal variance estimates. SIAM Review, 1964, 6: 115~120

[372] Pringle R M, Rayner A A. Expressions for generalized inverses of a bordered matrix with application to the theory of constrained linear models. SIAM Review, 1970, 12: 107~115

[373] Pringle R M, Rayner A A. Generalized Inverse of Matrices with Applications to Statistics. London: Griffin 1971

[374] Proakis J G. Digital Communications (3rd edition). New York: McGraw-Hill, 1995

[375] Rabiner L R, Schafter R W. Digital Processing of Speech Signal. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall, 1978

[376] Rabiner L R, Crochine R E, Allen J B. FIR system modeling and identification in the presence of noise and with band-limited inputs. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1987, 36: 319~333

[377] Rader C M, Steinhardt A O. Hyperbolic Householder transforms. SIAM J Matrix Anal Appl, 1988, 9: 269~290

[378] Rado R. Note on generalized inverse of matrices. Proc Cambridge Philos Soc, 1956, 52: 600~601

[379] Raghothaman B, Linebarger D A, Begusic D. A new method for low-rank transform domain adaptive filtering. IEEE Trans Signal Processing, 2000, 48(4): 1097~1109

[380] Rahman M A, Yu K B. Total least squares approach for frequency estimation using linear prediction. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1987, 35: 1440~1454

[381] Rao C R. A note on a generalized inverse of a matrix with applications to problems in mathematical statistics. J Roy Statist Soc, Series B, 1962, 24: 152~158

[382] Rao C R. Estimation of heteroscedastic variances in linear models. J Amer Statist Assoc, 1970, 65: 161～172

[383] Rao C R, Mitra S K. Generalized Inverse of Matrices. New York: John Wiley & Sons, 1971

[384] Rayleigh L. The Theory of Sound. 2nd ed. New York: Macmillian, 1937

[385] Rellich F. Perturbation Theory of Eigenvalue Problems. New York: Gordon and Breach, 1969

[386] Regalia P A, Mitra S. Kronecker propucts, unitary matrices and signal processing applications. SIAM Review, 1989, 31(4): 586～613

[387] Regalia P A, Bellanger M G. On the quality between fast QR methods and lattice methods in least squares adaptive filtering. IEEE Trans Signal Processing, 1991, 39: 879～891

[388] Riba J, Goldberg J, Vazquez G. Robust beamforming for interference rejection in mobile communications. IEEE Trans Signal Processing, 1997, 45(1): 271～275

[389] Rohde C A. Generalized inverses of partitioned matrices. SIAM J Appl Math, 1965, 13: 1033～1035

[390] Rohde C A. Some results on generalized inverses. SIAM Review, 1966, 8: 201～205

[391] Rombouts G, Moonen M. A sparse block exact affine projection algorithm. IEEE Trans Speech, Audio Processing, 2002, 10(2): 100～108

[392] Roorda B, Hejj C. Global total least squares modeling of multivariable time series. IEEE Trans Automatic Control, 1995, 40: 50～63

[393] Rosenberg M. Range decomposition and generalized inverse of nonnegative Hermitian matrices. SIAM Review, 1969, 11(4): 568～571

[394] Roy R, Kailath T. ESPRIT — Estimation of signal parameters via rotational invariance techniques. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1989, 37: 297～301

[395] Rupp M. A family of adaptive filter algorithms with decorrelating properties. IEEE Trans Signal Processing, 1998, 46(3): 771～775

[396] Saad Y. The Lanczos biothogonalization algorithm and other oblique projection methods for solving large unsymmetric systems. SIAM J Numer Anal, 1982, 19: 485～506

[397] Saad Y. Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems. New York: Machester University Press, 1992

[398] Sakurai J J. Modern Quantum Mechanics. Redwood City, CA: Addison Wesley, 1985

[399] Salehi H. On the alternating projections theorem and bivariate stationary stichastic processes. Trans Amer Math Soc, 1967, 128: 121～134

[400] Samson C. A unified treatment of fast algorithms for identification. International J Control, 1982, 35: 909～934

[401] Sankaran S G, Beex A A. Convergence behavior of affine projection algorithms. IEEE Trans Signal Processing, 2000, 48(4): 1086～1096

[402] Sarkar T K, Dianat S A, Chen H, Brule J D. Adaptive spectral estimation by the conjugate gradient method. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1986, 34: 272～284

[403] Sarkar T K, Yang X, Arvas E. A survey of conjugate gradient algorithms for solution of extreme eigen-problems of a symmetric matrix. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1989, 37: 1550～1556

[404] Sayed A H, Kailath T. A state-space approach to adaptive RLS fitering. IEEE Signal Processing Mag, 1994, 11: 18~60

[405] Scales L E. Introduction to Non-linear Optimization. London: Macmillan, 1985

[406] Schmidt R O. Multiple emitter location and signal parameter estimation. Proc RADC Spectral Estimation Workshop, NY: Rome, 1979, 243~258

[407] Schmidt O R. Multiple emitter location and signal parameter estimation. IEEE Trans Antenna Propagat., 1986, 34: 276~280

[408] Schreiber R. Implementation of adaptive array algorithms. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1986, 34: 1038~1045

[409] Schur I. On the characteristic roots of a linear substitution with an application to the theory of integral equations. Math Ann, 1909, 66: 488~510 (German)

[410] Schoukens J, Pintelon R, Vandersteen G, Guillaume P. Frequency-domain system identification using nonparametric noise models estimated from a small number of data sets. Automatica, 1997, 33(6): 1073~1086

[411] Searle S R. Matrix Algebra Useful for Statististics. New York: John Wiley & Sons, 1982

[412] Sharman K, Durrani T S. A comparative study of modern eigenstructure methods for baering estimation — A new high performance approach. Proc IEEE ICASSP-87, Greece, Athens, 1987, 1737~1742

[413] Shavitt I, Bender C F, Pipano A, Hosteny R P. The iterative calculation of several of the lowest or highest eigenvalues and corresponding eigenvectors of very large symmetric matrices. J Comput Phys, 1973, 11: 90~108

[414] Sherman J, Morrison W J. Adjustment of an inverse matrix corresponding to changes in the elements of a given column or a given row of the original matrix (abstract). Ann Math Statist, 1949, 20: 621

[415] Sherman J, Morrison W J. Adjustment of an inverse matrix corresponding to a change in one element of a given matrix. Ann Math Statist, 1950, 21: 124~127

[416] Shi Y, Zhang X D (张贤达). Kalman-filtering-based angular velocity estimation using infrared attitude information of spacecraft. Optical Eng., 2000, 39: 551~557

[417] Shi Y, Zhang X D (张贤达). Gabor atom network for signal classification with application in radar target recognition. IEEE Trans Signal Processing, 2001, 49: 2994~3004

[418] Shynk J. Frequency-domain and multirate adaptive filtering. IEEE Signal Processing Mag, 1992, 9(1): 14~39

[419] Silvery S D. Statistical Inference. Penguin books, 1970

[420] Simon J C. Patterns and Operators: The Foundations and Data Representation. North Oxford Academic Publishers Ltd, 1986

[421] Sleijpen G L G, van der Vorst H A. A Jacobi-Davidson iteration method for linear eigenvalue problems. SIAM J Matrix Anal Appl, 1996, 17: 401~425

[422] So H C, Chan Y T, Analysis of an LMS algorithm for unbiased impulse response estimation. IEEE Trans Signal Processing, 2003, 51(7): 2008~2013

[423] Söderström T, Stoica P, System Identification. Prentice-Hall, 1989

[424] Speiser J, and Van Loan C. Signal processing computations using the generalized singular value decomposition. In: Proc of SPIE, Vol495, SPIE International Symposium, San Diego, 1984

[425] Stallings W T, Boullion T L. Computation of pseudoinverse matrices using residue arithmetic. SIAM Review, 1972, 14(1): 152~163

[426] Steedly W M, Ying C H J, Moses R L. A modified TLS-Prony method using data decimation. IEEE Trnas. Signal Processing, 1994, 42: 2292~2303

[427] Steedly W M, Ying C H J, and Moses R L. Statistical analysis of TLS-based Prony techniques. Automatica (Special Issue on Statistical Signal Processing and Control), 1994, 30: 115~129

[428] Stewart G W. On the sensitivity of the eigenvalue problem $Ax = \lambda Bx$. SIAM J Num Anal, 1972, 9: 669~686

[429] Stewart G W. An Introduction to Matrix Computations. New York: Academic Press, 1973

[430] Stewart G W. Computing the CS decomposition of a partitioned orthonomal matrix. Numer Math, 1982, 40: 297~306

[431] Stewart G W, Sun J G. Matrix Perturbation Theory. New York: Academic Press, 1990

[432] Stewart G W. An updating algorithm for subspace tracking. IEEE Trans Signal Processing, 1992, 40: 1535~1541

[433] Stewart G W. On the early history of the singular value decomposition. SIAM Review, 1993, 35(4): 551~566

[434] Stiefel E. Richtungsfelder und ferparallelismus in n-dimensionalem mannig faltigkeiten. Commentarii Math Helvetici, 1935-1936, 8: 305~353

[435] Strobach P. New forms of Levinson and Schur algorithms. IEEE Signal Processing Magazine, 1991, 8: 12~36

[436] Stoica P, Sorelius J, Cedervall M, Söderström T. Error-in-vaables modeling: An instrumental variable approach. In: Van Huffel S ed. Recent Advances in Total Least Squares Techniques and Error-in-Variables Modeling, Philadelphia, PA: SIAM, 1997

[437] Swami A, Mendel J M. Time and lag recursive computation of cumulants from a state space model. IEEE Trans Automatic Control, 1990, 35: 4~17

[438] Swami A, Mendel J M. Identifiability of the AR parameters of an ARMA process using cumulants. IEEE Trans Automatic Control, 1992, 37: 268~273

[439] Takagi T. On an algebraic problem related to an analytic theorem of Caratheodory and Fejer and on an allied theorem of Landau. Japanese J Math, 1925, 1: 83~93

[440] Takeuchi K, Yanai H, Mukherjee B N. The Foundations of Multivariante Analysis. New York: Wiley, 1982

[441] Tanaka M, Makino S. A block exact fast affine algorithm. IEEE Trans Speech, Audio Processing, 1999, 7(1): 79~86

[442] Thompson P A. An adaptive spectral analysis technique for unbased frequency estimation in the present of white noise. In: Proc 13th Asilomar Conf. Circuits, Syst, Comput, Pacific Grove, 1980

[443] Tikhonov A, Arsenin V. Solution of Ill-Posed Problems. New York: Wiley, 1977

[444] Tisseur F, Meerbergen K. Quadratic eigenvalue problem. SIAM Review, 2001, 43(2): 235~286

[445] Toeplitz O. Zur Theorie der quadratischen und bilinearen Formen von unendlichvielen Veränderlichen. I Teil: Theorie der L-Formen, Math Annal, 1911, 70: 351~376

[446] Tong L, Liu R W, Soon V C, Huang Y F. Indeterminacy and identifiability of blind identification. IEEE Trans Circuits Systems, 1991, 38(5): 499~509

[447] Tou J T, Gonzalez R C. Pattern Recognition Principles. London: Addison-Wesley Publishing Comp, 1974

[448] Townsend M A, Johnson G E. In vavor of conjugate direction: A generalized acceptable-point algorithm for function minimization. J Franklin Inst, 1978, 306(5)

[449] Trench W F. An algorithm for the inversion of finite Toeplitz matrices. J SIAM, 1964, 12: 515~522

[450] Tsatsanis M K, Z. Xu. Performance analysis of minimum variance CDMA receivers. IEEE Trans Signal Processing, 1998, 46: 3014~3022

[451] Tufts D W, Francis J T. Designing digital lowpass filters: Comparison of some methods and criteria. IEEE Trans Audio Electroacoust., 1970, 18: 487~494

[452] Tugnait J K. Detection of non-Gaussian signals using integrated polyspectrum. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42: 3137~ 3149

[453] Turnbull H, Aitken A. An Introduction to the Theory of Canonical Matrices. Blckie, London: Glasgow, 1932

[454] Utschick W. Tracking of signal subspace projectors. IEEE Trans Signal Processing, 2002, 50(4): 769~778

[455] Vaidynathan P P, Ngnyen T Q. Eigenfilter: A new approach to least-squares FIR filter design and applications including Nyquist filters. IEEE Trans Circuits Syst., 1987, 34: 11~23

[456] Vaidynathan P P. Multirate Systems and Filter Banks. Englewood Cliffs: Prentice Hall, 1993

[457] van der Veen A J. Joint diagonalization via subspace fitting techniques. Proc 2001 IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP '01), 2001, 5: 2773~2776

[458] Van Huffel S, Vandewalle J. Analysis and properties of the generalized total least squares problem $Ax = b$ when some or all columns in A are subject to error. SIAM J Matrix Anal Appl, 1989, 10: 294~315

[459] Van Huffel S, Vandewalle J. On the accuracy of total least squares and least squares techniques in the presence of errors on all data. Automatica, 1989, 25: 765~769

[460] Van Huffel S (Ed). Recent Advances in Total Least Squares Techniques and Error-in-Variables Modeling. Philadelphia, PA: SIAM, 1997

[461] Van Huffel S. TLS applications in biomedical signal processing. In: Van Huffel S ed. Recent Advances in Total Least Squares Techniques and Error-in-Variables Modeling, Philadelphia, PA: SIAM, 1997

[462] Van Loan C F. Generalizing the singular value decomposition. SIAM J Numer Anal, 1976, 13: 76~83

[463] Van Loan C F. Matrix computations and signal processing. In: Haykin S ed. Selected Topics in Signal Processing, Englewood Cliffs: Prentice-Hall, 1989

[464] van Overschee P, De Moor B. Subspace Identification for Linear Systems. Boston, MA: Kluwer, 1996

[465] Vandaele P, Moonen M. Two deterministic blind channel estimation algorithms Based on Oblique Projections. Signal Processing, 2000, 80: 481~495

[466] Veen A V D. Algebraic methods for deterministic blind beamforming. Proc IEEE, 1998, 86: 1987~2008

[467] Viberg M, Ottersten B. Sensor array processing based on subspace fitting. IEEE Trans Signal Processing, 1991, 39: 1110~1121

[468] Visuri S, Oja H, Koivcenen V. Space-based direction-of-arrival estimation using nonparametric statistics. IEEE Trans Signal Processing, 2001, 49(9): 2060~2073

[469] Vlasenko V, Rao K R. Unified matrix treatment of discrete transforms. IEEE Trans Comput, 1979, 28: 934~938

[470] Watkins D S. Understanding the QR algorithm. SIAM Review, 1982, 24(4): 427~440

[471] Wax M, Kailath T. Determination of the number of signals by information theoretic criteria. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1985, 32: 817~827

[472] Wax M, Sheinvald J. A least squares approach to joint diagonalization. IEEE Signal Processing Letters, 1997, 4(2): 52~53

[473] Wedin P A. Perturbation bounds in connection with the singular value decomposition. BIT, 1972, 12: 99~111

[474] Weiss A J, Friedlander B. Array processing using joint diagonalization. Signal Processing, 1996, 1996, 50(3): 205~222

[475] Widrow B, Hoff Jr. M E. Adaptive switching circuits. IRE WEDCON Conv Rec, 1960, part 4: 96~104

[476] Widrow B, Steams S D. Adaptive Signal Processing. Englewood Cliffts: Prentice Hall, 1985

[477] Wilkinson J H. Householder's method for symmetric matrices. Nume Math, 1962, 4: 354~361

[478] Wilkinson J H. The Algerbaic Eigenvalue Problem. Oxford, UK: Clarendon Press, 1965

[479] Wilkinson J H. Global convergence of tridiagonal QR algorithm with origin shifts. Linear Alg and Its Applic, 1968, 1: 409~420

[480] Wolf J K. Redundancy, the discrete Fourier transform, and impulse noise cancellation. IEEE Trans Commun, 1983, 31: 458~461

[481] Woodbury M A. Inverting modified matrices. Memorandum Report 42, Statistical Research Group, NJ: Princeton, 1950

[482] Xu G, Cho Y, Kailath T. Application of fast subspace decomposition to signal processing and communication problems. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42: 1453~1461

[483] Xu G, Kailath T. Fast subspace decomposition. IEEE Trans Signal Processing, 1994, 42: 539~551

[484] Xu L, Oja E, Suen C. Modified Hebbian learning for curve and surface fitting. Neural Networks, 1992, 5: 441~457

[485] Yang B. Projection approximation subspace tracking. IEEE Trans Signal Processing, 1995, 43: 95~107

[486] Yang B. An extension of the PASTd algorithm to both rank and subspace tracking. IEEE Signal Processing Letters, 1995, 2(9): 179~182

[487] Yang H, Zhang X D (张贤达). A fast maximum likelihood sequence decoding method for multicarrier DS-CDMA using frequency spread coding. IEEE Trans Wireless Communications, 2004, 3(3): 770~780

[488] Yang H H, Amari S. Adaptive on-line learning algorithms for blind separation — maximum entropy and minimum mutural information. Neural Computation, 1997, 9: 1457~1482

[489] Yang H H. Series updating rule for blind separation derived from the method of scoring. IEEE Trans Signal Processing, 1999, 47: 2279~2285

[490] Yang J F, Kaveh M. Adaptive eigensubspace algorithms for direction or frequency estimation and tracking. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1988, 36: 241~251

[491] Yang X, Sarkar T K, Arvas E. A survey of conjugate gradient algorithms for solution of extreme eigen-problems of a symmetric matrix. IEEE Trans Acoust, Speech, Signal Processing, 1989, 37: 1550~1556

[492] Yang Y. A matrix trace inequality. J. Mathematical Analysis and Applications, 1988, 133: 573~574

[493] Yeredor A. Non-orthogonal joint diagonalization in the least squares sense with application in blind source separation. IEEE Trans Signal Processing, 2002, 50(7): 1545~1553

[494] Yeredor A. Time-delay estimation in mixtures. Proc 2003 IEEE International Conference on Acoustics, Speech, and Signal Processing (ICASSP '03), 2003, 5: 237~240

[495] Youla D C. Generalized image restoration by the method of altenating projections. IEEE Trans Circuits and Systems, 1978, 25: 694~702

[496] Yu K B. Recursive updating the eigenvalue decomposition of a covariance matrix. IEEE Trans Signal Processing, 1991, 39: 1136~1145

[497] Yu X, L Tong. Joint channel and symbol estimation by oblique projections. IEEE Trans Signal Processing, 2001, 49(12): 3074~3083

[498] Zadeh L A, Desoer C A. Linear System Theory: The State Space Approach, New York: McGraw-Hill, 1963

[499] Zha H. The restricted singular value decomposition of matrix triplets. SIAM J Matrix Anal Appl, 1991, 12: 172~194

[500] Zha H. A numerical algorithm for computing restricted singnlar value decomposition of matrix triplets. Linear Algebra Appl, 1992, 168: 1~25

[501] Zhang Q F, Leung Y W, A class of learning algorithms for principal component analysis and minor component analysis. IEEE Trans Neural Networks, 2000, 11(1): 200~204

[502] Zhang X D (张贤达), Takeda H. An order recursive generalized least squares algorithm for system identification. IEEE Trans Automatic Control, 1985, 30: 1224~1227

[503] Zhang X D (张贤达), Takeda H. Order-recursive methods for instrumental variable estimates and instrumental variable inverses. Int. J. Systems Sci., 1987, 18: 1943~1951

[504] Zhang X D (张贤达), Cui D Y. Performance analysis of Kimura and Honoki's hybrid approach to 2-D spectral estimation. IEEE Trans Acouts, Speech, Signal Processing, 1990, 38: 191~193

[505] Zhang X D (张贤达). On the estimation of two-dimensional moving average parameters. IEEE Trans Automatic Control, 1991, 36: 1196~1199

[506] Zhang X D (张贤达), Zhang Y S. Determination of the MA order of an ARMA process using sample correlations. IEEE Trans Signal Processing, 1993, 41: 2277~2280

[507] Zhang X D (张贤达), Zhang Y S. Singular value decomposition-based MA order determination of nan-Gaussian ARMA models. IEEE Trans Signal Processing, 1993, 41: 2657~2664

[508] Zhang X D (张贤达), Liang Y C. Prefiltering-based ESPRIT for estimating parameters of sinusoids in non-Gaussian ARMA noise. IEEE Trans Signal Processing, 1995, 43: 349~353

[509] Zhang X D (张贤达), Shi Y, Bao Z. A new feature vector using selected bispectra for signal classification with application in radar target recognition. IEEE Trans Signal Processing, 2001, 49: 1875~1885

[510] Zhang X D (张贤达), Wei W. Blind adaptive multiuser detection based on Kalman filtering. IEEE Trans Signal Processing, 2002, 50: 87~95

[511] Zhao L C, Krishnaiah P R, Bai Z D. On detection of the number of signals in presence of white noise. J. Multivarite Anal., 1986, 20: 1~25

[512] Zhou N, Clark J V, Pister K S J. Nodal simulation for MEMS design using SUGAR v0.5 . In: International Conference on Modeling and Simulation of Microsystems, Semiconductors, Sensors and Actuators, Santa Clara, CA, 1998, 308~313; also available at http: //www-bsac.EECS. Berkely.EDU/-cfm/publication. html

[513] Zhu X L, Zhang X D (张贤达). Adaptive RLS algorithm for blind source separation using a natural gradient. IEEE Signal Processing Letters, 2002, 9(12): 432~435

[514] 成田诚之助著，张贤达译. 数字系统控制理论及应用. 北京：机械工业出版社，1984

[515] 陈景良，陈向辉. 特殊矩阵. 北京：清华大学出版社，2001

[516] 黄琳，系统与控制理论中的线性代数，北京：科学出版社，1984

[517] 《数学手册》编写组. 数学手册. 北京：高等教育出版社，1979

[518] 依理正夫，児玉慎三，須田信英. 特異值分解とそのシステム制御への応用. 計測と制御，1982，21: 763~772

[519] 张贤达. 左、右伪逆矩阵的数值计算. 科学通报，1982，27(2): 126

[520] 张贤达. 现代信号处理. 北京：清华大学出版社，1995

[521] 张贤达. 时间序列分析 —— 高阶统计量方法. 北京：清华大学出版社，1996

[522] 张贤达. 信号处理中的线性代数. 北京：科学出版社，1997

[523] 张贤达，保铮. 通信信号处理. 北京：国防工业出版社，2000

[524] 张贤达. 现代信号处理 (第二版). 北京：清华大学出版社，2002

[525] 张贤达，朱孝龙，保铮. 基于分阶段学习的盲信号分离. 中国科学 (E 辑)，2002，32(05): 693~703

索　引

V

W

X